

FIS. 41

UNIVERSIDADE EDUARDO MONDLANE
FACULDADE DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

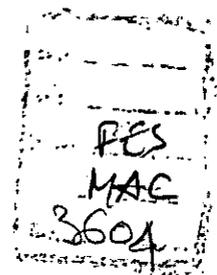
TRABALHO DE LICENCIATURA

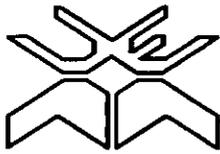
**Estrutura do Espectro dos Portadores em Filmes de Superfícies
Congruentes**

AUTOR:

ALBERTO JULIÃO MACAMO

MAPUTO, ABRIL DE 1999





UNIVERSIDADE EDUARDO MONDLANE
FACULDADE DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA

TRABALHO DE LICENCIATURA

**Estrutura de Espectro dos Portadores em Filmes de Superfícies
Congruentes**

SUPERVISOR:

PROF. DOUTOR VOLODYMYR BURDEYNYI

MAPUTO, ABRIL DE 1999

A memória de Julião Mudanisse Macamo, o amável pai,
a dona Marta Chaúque, a mãezinha, à memória da Zaida Lucas,
à Lina Rafael Langa
e aos meus filhos, Belton e Ulnisse.

Agradecimentos

Este trabalho é resultado do apoio que me foi prestado, por aqueles que acreditaram na minha formação. Pelo que agradeço:

Ao Prof. Doutor Burdeynny V.M., meu supervisor, pelo incansável apoio, inestimáveis pontos de vista e pela elevada paciência que teve ao longo da realização deste trabalho.

À direcção do Departamento de Física, nas pessoas do dr. Hermínio Tembe e da dr^a Mayra Hernandez de Sousa, pela elevada flexibilidade no desbloqueamento de todos aspectos burocráticos.

À todos os meus docentes, particularmente ao Prof. Doutor Tchernych V.V., ao Prof. Doutor Yuri Rakov, ao Prof. Doutor Rogério Utui, ao Prof. Doutor Boaventura Cuamba, pela maneira simples e coerente de estar na ciência.

Aos meus colegas do curso, especialmente ao Humberto Mutevuie, Félix Tomo, João Lobo, Faustino Nhanombe, Rego, pelo apoio que me prestaram ao longo do curso.

Ao dr. Saíde, dr. Genito, dr. Amino, dr. Sacate, pelos valiosos pontos de vista e opiniões que me concederam.

A todo o pessoal do Capacity Building Project (CBP), em particular ao senhor Luis de Carvalho, pela possibilidade de divulgação e da publicação dos resultados obtidos na conferência do SAIP-98.

Aos meus amigos dr Tiago, Alfredo, Germano, Cossa, Hilário Cossa, Emilia Jossai, Naima Saú, Vaniza, Marta Gracinda e as minhas irmãs, pela ajuda que sempre me concederam.

Aos membros do CTA do Departamento de Física, em particular ao sr. Santos Luis Victorino, sr. Joaquim Namburete, sr. Cossa, sr. Simões Mbuluco, sr. Jorge, dona Rosa Nhambe e dona Etelvina, pelo apoio concedido ao longo do curso.

DECLARAÇÃO DE HONRA

Este trabalho foi completamente realizado com base no material, a que ao longo do mesmo se faz referência. As ideias originais nele expressas são de inteira responsabilidade do autor.

Maputo, Abril de 1999

O autor

Alberto Julião Macamo
(Alberto Julião Macamo)

RESUMO

O objectivo deste trabalho é investigar a estrutura do espectro electrónico dum modelo de filmes de superfícies congruentes (FSC) uniforme ao longo do eixo-y.

Foram feitas pesquisas bibliográficas, referentes à quantificação dimensional (QD); classificação dos filmes; método geral de investigação de filmes de espessura variável e possibilidades tecnológicas.

Efectua-se a dedução e resolução da equação secular e discussão dos métodos de aproximação.

Usa-se a teoria geral de resolução de equação diferencial com coeficientes periódicos e a teoria de perturbação.

Os resultados dos cálculos numéricos da equação secular (parte esquerda desta equação), estão em concordância com a função de onda. Estes resultados são também confirmados de acordo com o método de aproximação de ordem zero.

ÍNDICE.

1.	INTRODUÇÃO.....	3
2.	QUANTIFICAÇÃO DIMENSIONAL E CLASSIFICAÇÃO DOS FILMES.....	5
	1. <i>Conceitos Básicos da Teoria de Quantificação Dimensional.....</i>	<i>5</i>
	2. <i>Classificação dos Filmes.....</i>	<i>9</i>
3.	FILME DE ESPESSURA VARIÁVEL E APROXIMAÇÃO ADIABÁTICA.....	10
	1. <i>Conceitos Básicos de Filmes de Espessuras Variáveis.....</i>	<i>10</i>
	2. <i>Filme de fronteiras arbitrárias.....</i>	<i>10</i>
4.	FILME DE SUPERFÍCIES CONGRUENTES.....	13
	1. <i>Escolha do Modelo Teórico.....</i>	<i>13</i>
	2. <i>Discussão do Modelo Escolhido.....</i>	<i>18</i>
5.	DEDUÇÃO DA EQUAÇÃO SECULAR.....	19
6.	SOLUÇÕES APROXIMADAS DA EQUAÇÃO SECULAR.....	23
7.	DISCUSSÃO DOS RESULTADOS.....	35
8.	CONCLUSÃO.....	38
9.	RECOMENDAÇÕES.....	39
10.	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	40
11.	ANEXOS.....	42
	1. <i>Anexo₁.....</i>	<i>43</i>
	2. <i>Anexo₂.....</i>	<i>48</i>
	3. <i>Anexo₃.....</i>	<i>51</i>
	4. <i>Anexo₄.....</i>	<i>52</i>

1. Introdução

As primeiras investigações sistemáticas dos filmes, isto é, os objectos, um de três tamanhos lineares, dos quais fosse muitas vezes menor que dois tamanhos restantes, foram empreendidas segundo as fontes bibliográficas [1] e por J. W. Gibbs [2] que avançando com um dos métodos desenvolvidos por seus esforços, estudou em particular as propriedades Termodinâmicas de tensão superficial. No entanto, o progresso essencial em entendimento das propriedades dos filmes foi conseguido graças as pesquisas cumpridas por Devisson e Germer. Além demais estas propriedades foram aprofundadas por vários autores tais como; Scheibken e Hartmann [3]. Devisson e Germer elaboraram o método de difracção dos electrões lentos (electrões de energia (20 – 500) eV) que permite investigar a estrutura atômica dos filmes e por intermédio das amplitudes de espalhamento estabelecer a distribuição de carga eléctrica dentro dum filme. A essa época também se referem as famosas obras de Langmuir, quem investigou os problemas dos filmes monoatômicos formados por via de absorção. Conforme a monografia[4], Langmuir e sua colaboradora Katherine Blodgett foram os primeiros a mostrarem claramente a diferença fundamental entre os filmes e sólidos tridimensionais e introduziram o conceito de “mundo bidimensional” referindo-se aos filmes.

Entretanto, até aos anos 50 a investigação dos filmes ainda não tinha atingido o nível de completabilidade que nessa altura fora peculiar a Física dos sólidos cristalinos, embora as ideias básicas de Mecânica Quântica e Física Estatística demonstraram todas as suas possibilidades. Este estado das coisas explica-se de uma forma bastante simples, pois, os principais esforços foram dirigidos para estudar metais e semicondutores de estrutura e simetria cristalina, bem conhecidas isto é, os sólidos em relação aos quais já foram elaborados os métodos teóricos e experimentais que permitem apresentar o quadro quantitativo dos fenómenos ópticos, cinéticos, magnéticos, etc. Para além disso, o mais importante é que nessa época se revelou e aprofundou-se a tendência de substituir o equipamento vácuo-electrónico por dispositivos de semicondutores. Exactamente esta revolução com base elementar da electrónica criou o impulso potente para desenvolver as pesquisas relacionadas com a Física dos cristais. Quanto aos filmes foi comparavelmente estreita a base das suas aplicações práticas, não existiam as tecnologias bem controladas e reproduzíveis que permitissem fabricar filmes com os parâmetros exigidos. A situação acima esboçada mudou radicalmente no início dos anos 70 quando se levantou o problema de aumentar a velocidade de elaboração de informação bem como a densidade do fluxo de informação. Um dos caminhos

possíveis de resolver este problema foi a passagem para a tecnologia de película que pudesse aumentar a densidade dos elementos básicos e criar os dispositivos microelectrónicos de nova geração.

Por isso mesmo foram elaborados vários métodos bastantes sofisticados, tais como: epitaxia de feixe molecular de fabricar filmes com os parâmetros definitivos. Por sua vez a necessidade de desenvolver uma tecnologia mais avançada fez aprofundar as investigações das propriedades fundamentais dos filmes, tais como espectro energético, fenómenos de transporte, transições de fase, efeitos colectivos. Desde então, atingiu-se um progresso extraordinário no entendimento e interpretação das propriedades físicas dos filmes e foi criada uma base sólida para as suas aplicações práticas. Os pormenores deste movimento avançado e os resultados concretos são apresentados em várias revistas[5-9] e monografias[4,10].

Segundo Coutts T.J. e Meakin J.D.[11], a área de perspectiva, onde os filmes podem ser efectivamente aplicados é relacionado com a transformação directa de energia solar em energia eléctrica que se baseia no uso dos efeitos fotovoltaicos. A partir dos anos 80 certo nível de produção industrial adquiriu vários tipos das fotocélulas cujo elemento básico é a película de semiconductor. No entanto, as fotocélulas mesmo aquelas que têm os valores satisfatórios de parâmetros, ainda não atingiram os limites teóricos previstos. Esta observação, em primeiro lugar, refere-se ao rendimento de transformação de energia cujo valor mais alto na altura era de 20% enquanto, conforme as avaliações teóricas, o rendimento máximo pode ser de cerca de 60 % (fotocélula de cascata que se baseia no uso do GaAs, fotocélula de cascata com os concentradores de radiação solar). Visto que existe o recurso bem amplo de aperfeiçoar os dispositivos fotovoltaicos não é surpreendente que investigações de vários planos para além dos semicondutores tradicionais, envolvam materiais novos bem como estruturas novas tais como: heterojunções tensas, sistemas bidimensionais (filmes no fundo) com os poços quânticos, composições de filme estratificadas, etc.

Em Moçambique os problemas relacionados com transformação da energia têm importância extraordinária devido as razões económicas, sociais e ambientais. No Departamento de Física da UEM está -se a realizar o projecto que se refere a implantação vasta dos métodos fotovoltaicos.

Este trabalho é uma tentativa modesta de contribuir para as pesquisas que se efectuam neste contexto por via de investigação do espectro electrónico dum modelo concreto do filme, pois, o

espectro energético é uma característica dominante que determina a maioria das propriedades entre as quais as propriedades fotoeléctricas.

2. Quantificação dimensional e classificação dos filmes.

1. Conceitos básicos da teoria de quantificação dimensional.

O papel dominante, na maioria dos casos sobretudo relacionados com as propriedades eléctricas e ópticas, é desempenhado pelas regularidades do espectro energético dos portadores de carga peculiares a filmes de semicondutores ou metais. Estas regularidades são relacionadas com a elaboração dos dispositivos electrónicos em geral e fotovoltaicos em particular. Portanto, é natural prestar atenção a uma propriedade fundamental do espectro que foi prevista e investigada em pormenor por autores do artigo[12]. Trata-se de uma propriedade chamada quantificação dimensional(QD). Uma vez que existem várias revistas dedicadas ao assunto[13], a consideração que será feita abaixo só aborda os resultados que são necessários para concretizar o objecto deste estudo.

Como se sabe[14], o espectro energético de qualquer sistema inclusive o filme, se determina por autovalores de equação de Schrödinger que em forma geral pode ser escrita de modo seguinte:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, z) + V(\vec{r}, z) \Psi(\vec{r}, z) = E \Psi(\vec{r}, z) \quad , \quad (2.1)$$

onde \vec{r} é um vector bidimensional correspondente ao movimento de uma partícula ao longo do filme, z é a coordenada referente ao movimento transversal e $V(\vec{r}, z)$ é a energia potencial do portador no campo cristalino incluindo o potencial de retenção isto é, o potencial que impede a fuga dos electrões fora do filme. Conforme o artigo [12], aceita-se a aproximação de massa eficaz isotrópica que designaremos daqui adiante por "m". Segundo a teoria dos sólidos[15], esta aproximação permite excluir a necessidade de concretizar a energia potencial do campo periódico. Quanto ao potencial de retenção sabe-se [16], que este possui a ordem de grandeza comparável com a energia de extracção electrónica isto é, cerca de (2 – 6) eV. Entretanto, em relação aos fenómenos acima mencionadas só é importante conhecer a posição dos níveis de energia baixa. Por isso, o potencial de retenção pode ser tratado como se criasse um poço potencial de profundidade infinita.

Todas as suposições que foram introduzidas pelos autores[12], permitem reduzir a equação (2.1)

para a forma:
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi(\vec{r}, z) = E \Psi(\vec{r}, z), \quad (2.2)$$

com as seguintes condições de fronteira:

$$\Psi(\vec{r}, z)|_{z=0} = 0 \quad \text{e} \quad \Psi(\vec{r}, z)|_{z=d} = 0, \quad (2.3)$$

onde d é a espessura do filme.

É evidente, que as condições de fronteira (2.3) resultam do comportamento do potencial de retenção e correspondem ao filme com as superfícies planas e paralelas entre si. Além disso, os resultados que seguem de equação(2.2) só se referem ao filme de espessura constante. A separação das variáveis é feita conforme a relação:

$$\Psi(\vec{r}, z) = e^{i\vec{k}\vec{r}} \Psi(z), \quad (2.4)$$

onde \vec{k} é vector de onda bidimensional, conduz a equação.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi(z)}{dz^2} = \left[E - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \right] \Psi(z), \quad (2.5)$$

e as condições de fronteira respectivas a função $\Psi(z)$ que de maneira óbvia se deduzem das fórmulas (2.3). O método de resolução da equação(2.5) dá-se nos vários livros de mecânica quântica (MQ), por exemplo[14], portanto, é suficiente escrever os autovalores de energia, isto é:

$$E_n(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} n^2, \quad (2.6)$$

onde "n" é número inteiro que se chama número quântico de QD.

De relação(2.6), conclui-se fundamental segundo os autores[12], que espectro electrónico do filme uniforme à espessura constante consiste de sub-bandas de modo que cada uma das sub-bandas corresponda ao movimento quase-livre dos portadores ao longo do filme. Esta modificação do espectro conforme a terminologia estabelecida chama-se quantificação dimensional.

Observa-se que o efeito de QD possui um traço tão acentuado, que se reduz ao caracter discreto do espectro referido ao movimento transversal. Entretanto, a discretização por si só ainda

não significa que QD possa ser incondicionalmente observável, pois, pelo menos dois factores principais podem impedir a revelação experimental da QD. O primeiro factor é a distorção de distribuição de Fermi-Dirac, devido ao movimento térmico que envolvendo quantidade significativa dos níveis, faz lhes perder a sua individualidade quântica. O segundo factor é a ampliação dos níveis quânticos devido aos processos de espalhamento. Esta ampliação sob certas condições pode provocar a sobreposição dos níveis e por este meio reduz a possibilidade de observar o efeito de quantificação. Os factores em questão limitam a espessura de que seja revelada a QD.

Sejam, ΔE e ΔE_t as distâncias mínimas entre os níveis e o intervalo das energias dentro do qual tem lugar a distorção de "degrau" de Fermi-Dirac. É óbvio, que QD será significativa se for satisfeita a condição:

$$\Delta E \gg \Delta E_t . \quad (2.7)$$

De equação (2.6), obtém-se:

$$\Delta E = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2md^2} . \quad (2.8)$$

Quanto a ΔE_t de acordo com [15], obtém-se:

$$\Delta E_t \cong 2k_B T , \quad (2.9)$$

onde T é a temperatura absoluta. Combinando as equações (2.7)-(2.9), obtém-se restrições sobrepostas aos valores possíveis de espessura da película:

$$d \ll \frac{\pi \hbar \sqrt{3}}{2 \sqrt{mk_B T}} . \quad (2.10)$$

A condição (2.10) é consequência óbvia dos princípios básicos de MQ. De acordo com estes princípios a distância dentro da qual o potencial varia essencialmente, deve ser muitas vezes menor que o comprimento de onda de Broglie, para que sejam reveladas as propriedades ondulatórias. Quanto, a ampliação dos níveis ΔE_e estimulada por espalhamento, pode ser avaliada segundo as relações de incerteza, isto é:

$$\Delta E_e \sim \frac{\hbar}{\tau} . \quad (2.11)$$

Nesta equação (2.11), τ é o tempo médio de relaxação. Por analogia com a equação (2.9), obtém-se a condição:

$$\Delta E \gg \frac{\hbar}{\tau} . \quad (2.12)$$

Considerando que a velocidade $v = \sqrt{\frac{2E}{m}}$ é fácil transformar (2.12) para a forma:

$$d \ll l, \quad (2.13)$$

onde l é comprimento médio do percurso livre.

O filme cuja espessura satisfaz as relações (2.10) e (2.13), de acordo com a terminologia estabelecida chama-se filme quântico. Um tipo dos filmes quânticos é objecto de investigação, mencionado neste trabalho, pois, exactamente os filmes quânticos revelam propriedades extraordinárias tais como: as oscilações[17] das grandezas termodinâmicas, definidas em função de $1/d$, ressonâncias dimensionais dos vários tipos[18], oscilações dos coeficientes cinéticos[10],etc. No entanto, as relações (2.10) e (2.13), permitem fazer avaliações numéricas, atribuindo aos parâmetros m e T os valores típicos $m \sim 10^{-30}$ kg e $T \sim 2-300$ K, obtém-se:

$$d < (50 - 5) \text{ nm} \quad (2.14)$$

O comprimento de caminho livre " l " depende de vários factores em particular da concentração das impurezas dos mecanismos de espalhamento e enquadra-se dentro do intervalo de l até 10^3 nm.

Observa-se que as relações (2.10) e (2.13) sobrepõem as limitações bastantes duras a espessura do filme quântico. Por isso, durante muito tempo as previsões teóricas só tinham interesse científico. A satisfação destas condições tornou-se atingível no ano 1971 quando o método de epitaxia molecular foi aplicado[20,21], a fim de fabricar filmes quânticos. As investigações dos filmes produzidos por meio desta tecnologia por completo confirmaram o efeito de QD. Por exemplo a fig.1 apresenta os resultados [22], que se referem ao coeficiente de absorção da luz em função da energia dos fotões.

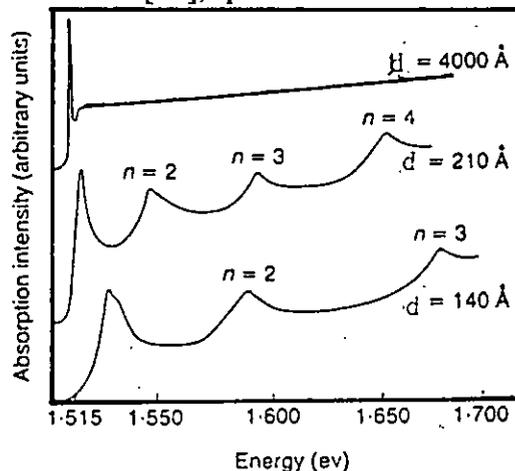


Fig.1 Coeficiente de absorção da luz em função da energia dos fotões [22].

Conforme as previsões teóricas feitas em termos da teoria do efeito de QD, o coeficiente de absorção deve possuir a estrutura de “degrau”. Observa-se que este comportamento tem sido comprovado por gráficos experimentais, dados na fig.1. Durante os últimos anos a tecnologia de criação das estruturas quânticas avançou muito, então, permite fabricar filmes de espessura e forma geométrica bem controladas e reproduzíveis. Hoje em dia, para estes objectivos, usam-se [23] os vários métodos em particular litografia electrónica de alta resolução, epitaxia de feixe molecular, precipitação química de vapor, precipitação química de vapor assistido por plasma ou radiação de laser e as suas combinações. A eficiência destes métodos mostra a fig.2 adoptada de artigo [24] que leva a imaginar as possibilidades de alta tecnologia, em criar as estruturas nanométricas.

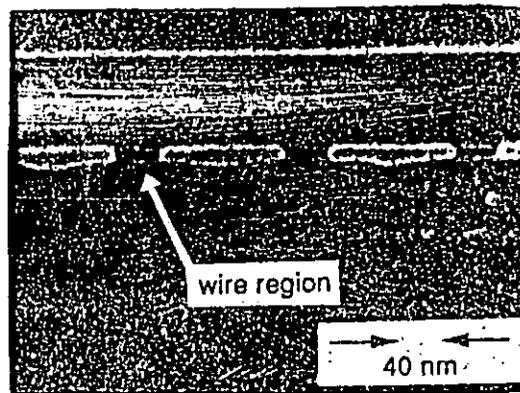


Fig.2 Exemplo de estrutura nanométrica adoptada de[24].

2. Classificação dos filmes.

Os filmes de um modo geral podem ser classificados por intermédio de várias maneiras tais como: a sua estrutura atómica, tecnologia de criação, as suas propriedades magnéticas, eléctricas, ópticas, etc. Mas para além desta classificação generalizada, sublinha-se o facto de que a QD permite dar a possibilidade de classificar filmes do ponto de vista das regularidades do espectro electrónico. Os que satisfazem as condições (2.10),(2.13) como foi mencionado, pertencem ao grupo dos filmes quânticos. As películas em relação às quais não seja satisfeita pelo menos uma destas condições chamam-se filmes clássicos. Estes ficam fora do estudo neste trabalho.

3. Filme de espessura variável e aproximação adiabática.

1. Conceitos básicos de filmes de espessuras variáveis.

Os resultados do parágrafo(2) reproduzidos de acordo com os artigos [12,18], referentes ao espectro energético dos filmes, como foi sublinhado, só são válidos em relação a um filme ideal com espessura constante. Entretanto, cria-se um interesse na investigação dos filmes de espessuras variáveis. De uma forma geral, as duas razões estimulam este interesse. Uma delas possui a natureza puramente tecnológica, pois, uma tecnologia mesmo avançada ainda não permite fabricar filmes com precisão dos planos atômicos, por um lado e para além disso, durante a exploração por via de regras, tem lugar a degradação das superfícies limitadas do filme. Por outro lado, o espectro energético é sensível em relação às condições de fronteira. Portanto, por via de factores geométricos consegue-se alcançar a estrutura determinada do espectro. Isso é mais uma razão para prestar atenção aos filmes de espessuras variáveis.

Uma das primeiras pesquisas dedicadas a este assunto foi feita pelos autores do artigo[25] em que foi considerado filme a forma de cunha. Aplicando a aproximação quase-clássica [14], os autores confirmaram que de facto aparecem os níveis virtuais provocados pela espessura variável. Os autores de artigo[26], investigaram as descargas de energia dos electrões devido a passagem através do filme com superfícies rugosas, isto é, aspecto importante para analisar o funcionamento do fotodíodo do filme, também comprovam a necessidade de se estudar filmes de género. A forma geral de resolver os problemas do espectro energético relacionados com os defeitos geométricos do filme quântico foi elaborada no artigo[27]. Daqui em diante este método ajusta-se a um modelo específico do filme que será concretizado durante as considerações posteriores.

2. Filme de fronteiras arbitrárias.

Filme de espessura variável é um filme fino limitado pelas superfícies que se descrevem com as equações:

$$\begin{cases} z_1 = \xi_1(\vec{r}) \\ z_2 = \xi_2(\vec{r}) + d_0 \end{cases} \quad (3.1)$$

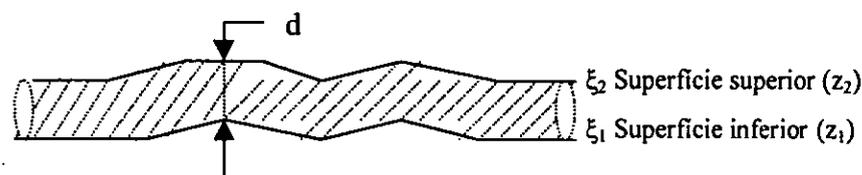


Fig.3 Modelo de filme de fronteiras arbitrárias.

Lembremo-nos que o potencial de retenção [16] possui a ordem de grandeza comparável com a energia de extracção electrónica de (2 - 6) eV, então, a autofunção e a densidade quântica do fluxo anulam-se. Isto significa que fora do filme a energia potencial possui tal valor, que a autofunção rapidamente diminui, tendendo para zero .

Tomando em conta que seja válida a aproximação da massa eficaz, a equação de Schrödinger será:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U(\vec{r}, z) \right] \Psi(\vec{r}, z) = E \Psi(\vec{r}, z) \quad (3.2)$$

Conforme a suposição sobre o comportamento da energia potencial, tem-se a relação:

$$U(\vec{r}, z) = \begin{cases} 0, & \text{dentro do filme} \\ \infty, & \text{fora do filme} \end{cases} \quad (3.3)$$

Seja d distância entre os pontos que possuem o mesmo vector de posição \vec{r} . Então, se $d = d_0 + \xi_2 - \xi_1$ é uma função do vector de posição e em princípio ξ_2 e ξ_1 são funções arbitrárias. Para satisfazer as condições de fronteiras no filme , a autofunção Ψ desenvolve-se por sistema das autofunções que são soluções da equação unidimensional.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_n}{dz^2} = E_n \Psi_n(z), \quad (3.4)$$

onde $E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2md^2} n^2$ é energia do estado estacionário referente ao número quântico "n".

Além demais $\Psi_n(z) |_{z=\xi_1} = \Psi_n(z) |_{z=d_0 + \xi_2} = 0$ são condições de fronteiras do filme de superfícies arbitrárias.

Como se trata de um filme de espessura variável, a função $\Psi_n(z)$ é definida por Landau L. e Lifchitz E. [14] :

$$\Psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{d}} \operatorname{sen} \frac{(z - \xi_1) \pi n}{d} \quad (3.5)$$

Lembremos que d depende de \vec{r} , então o desenvolvimento que são soluções da equação unidimensional, apresenta:

$$\Psi(\vec{r}, z) = \sum_n \Psi_n(\vec{r}) \Psi_n(z) \quad (3.6)$$

Substituindo a equação (3.6) em (3.2), tomando em conta que a função $\Psi_n(z)$ depende do vector de posição \vec{r} , através do parâmetro d , obtém-se:

$$\sum_n \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \left[\Psi_n(\vec{r}) \Psi_n(z) \right] + E_n \Psi_n(z) \Psi_n(\vec{r}) \right\} = E \sum_n \Psi_n(\vec{r}) \Psi_n(z) \quad (3.7)$$

Multiplicando à equação (3.7) pela função conjugada de $\Psi_l(z)$, integrando em relação a "z", tomando em conta o somatório de "n" e sabendo que:

$$\int \Psi_l^*(z) \Psi_n(z) dz = \delta_{nl} = \begin{cases} 0; n \neq l \\ 1; n = l \end{cases} \quad (3.8)$$

obtém-se a seguinte equação:

$$\sum_n -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\xi_1}^{\xi_1 + \xi_2} \left\{ \Psi_l^*(z) \nabla^2 \left[\Psi_n(\vec{r}) \Psi_n(z) \right] \right\} dz + E_l \Psi_l(\vec{r}) = E \Psi_l(\vec{r}) \quad (3.9)$$

Para calcular a integral da equação (3.9), deve-se considerar o desenvolvimento do seguinte operador de Laplace:

$$\nabla^2 \left[\Psi_n(\vec{r}) \Psi_n(z) \right] = \vec{\nabla} \left\{ \vec{\nabla} \left[\Psi_n(\vec{r}) \Psi_n(z) \right] \right\} \quad (3.10)$$

onde

$$\vec{\nabla} \left[\Psi_n(\vec{r}) \Psi_n(z) \right] = \Psi_n(\vec{r}) \vec{\nabla} \Psi_n(z) + \Psi_n(z) \vec{\nabla} \Psi_n(\vec{r}) \quad (3.11)$$

Então, substituindo a fórmula (3.11) à fórmula (3.10) obtém-se:

$$\nabla^2 \left[\Psi_n(\vec{r}) \Psi_n(z) \right] = \Psi_n(\vec{r}) \nabla^2 \Psi_n(z) + 2 \vec{\nabla} \Psi_n(\vec{r}) \vec{\nabla} \Psi_n(z) + \Psi_n(z) \nabla^2 \Psi_n(\vec{r}) \quad (3.12)$$

De acordo com a fórmula (3.5), onde a função $\Psi_n(z)$ depende de \vec{r} , através do parâmetro d e z não depende do vector \vec{r} , então tomando em conta estas considerações e efectuando os cálculos

intermediários, obtém-se uma fórmula diferencial que pode ser subdividida em dois aditivos para simplificar os cálculos. Estes aditivos encontram-se no **anexo 1** junto com as transformações intermediárias.

Entretanto, substituindo estas transformações à equação (3.9) e integrando, obtém-se o seguinte resultado:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_n(\vec{r}) + \Lambda_n \Psi_n(\vec{r}) + \sum_l' D_{ln} \Psi_l(\vec{r}) = E \Psi_n(\vec{r}), \quad (3.13)$$

onde Λ_n e D_{ln} correspondem aos elementos diagonais e não-diagonais respectivamente.

$$\Lambda_n = -\frac{\hbar^2}{2md^2} \left\{ \sqrt{\frac{2}{d}} \left[-\frac{1}{4} (\vec{\nabla} d)^2 - \pi^2 n^2 \left(\frac{1}{3} (\vec{\nabla} d)^2 + \vec{\nabla} \xi_1 \vec{\nabla} d + (\vec{\nabla} \xi_1)^2 \right) \right] \right\}, \quad (3.14)$$

$$D_{ln} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left\{ \frac{4nl(-1)^{n+l}}{n^2-l^2} \frac{\vec{\nabla} d}{d} \cdot \vec{\nabla} - \frac{(6n^2+2nl)nl(-1)^{n+l}}{(n^2-l^2)^2} \left(\frac{\vec{\nabla} d}{d} \right)^2 + (-1)^{n+l} \frac{2nl}{n^2-l^2} \frac{\nabla^2 d}{d} - \frac{8nl^3}{(n^2-l^2)^2} [(-1)^{n+l} - 1] \frac{\vec{\nabla} \xi_1 \vec{\nabla} d}{d^2} \right\}. \quad (3.15)$$

Importa salientar que o operador de Hamilton correspondente ao filme de fronteiras arbitrárias em representação matricial inclui por si termos de dois tipos essencialmente diferentes. Um destes tem forma diagonal e o outro pelo contrário é não-diagonal.

4. Filme de superfícies congruentes.

1. Escolha do modelo teórico.

De acordo com a análise feita no parágrafo (3), o operador de Hamilton correspondente ao filme arbitrário consiste de dois aditivos, onde um dos quais (3.14) tem a forma diagonal em relação aos números quânticos, descritos pela quantificação dimensional.

$$u_e = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{6md^2} \left[\left(\frac{\vec{\nabla} \xi_1}{d} \right)^2 + \left(\frac{\vec{\nabla} \xi_1}{d} \cdot \frac{\vec{\nabla} \xi_2}{d} \right) + \left(\frac{\vec{\nabla} \xi_2}{d} \right)^2 \right]. \quad (4.1)$$

A função u é energia potencial respectiva ao movimento bidimensional ao plano xoy . O outro aditivo (3.15) implica em si autofunções diferentes correspondentes a quantificação dimensional. Como este não é diagonal, estimula as transições quânticas entre os níveis de quantificação dimensional. Isto, deve-se ao espalhamento por não-homogeneidade das superfícies do filme. Ao limite $d \rightarrow \infty$ correspondente ao cristal maciço, os termos não-diagonais anulam-se, tal como acontece com a energia eficaz definida pela equação (4.1).

Portanto, os termos não-diagonais só influem sobre o espectro do sistema limitado a uma direcção do eixo- z . Quando se trata de um filme, são elaborados dois métodos aproximados que permitem investigar os termos considerados: i) Um deles usa-se a fim de se estudar filmes maciços em que a espessura média do filme " d " pode prevalecer nos tamanhos lineares das não-homogeneidade superfícies, isto é, $d \gg (h, r)$, onde " h " é parâmetro característico correspondente ao eixo- z e " r " é tamanho característico ao plano do filme. ii) Se for realizada a condição (i), pode ser aplicável a teoria de perturbação, em que na qualidade dos parâmetros de desenvolvimento de Wigner-Brilluin [28], servem as relações h/d e r/d . iii) Se o filme fosse feito de tal maneira que a espessura média pudesse ser comparável com os tamanhos lineares do relevo superficial, poderia ser aplicável outro método equivalente a aproximação adiabática [15], em teoria dos sólidos. Esta reduz-se a separação do movimento rápido por um lado e lento por outro lado. Nos sólidos, o movimento rápido é realizado pelos electrões e os iões efectuam o movimento lento, isto é, $w_r \gg w_i$. Onde w_r e w_i são frequências respectivas. Segundo esta relação é admissível considerar o movimento dos electrões, tal como se repousassem os iões num sólido. Consequentemente autofunções dos electrões só dependem das posições instantâneas dos iões. Portanto, os subsistemas das partículas leves "electrões" e das partículas pesadas "iões", na primeira aproximação consideram-se como se fossem independentes. Pelo que, para um filme fino, a ideia é geral e foi argumentada por Baskin-Entin [27]. Os quais investigaram os níveis locais criados por distorções de superfície de um filme quântico.

A frequência característica respectiva ao movimento transversal " w_t " é cerca de $h/2md^2$, por sua vez a frequência ao movimento longitudinal " w_l " é $hk_0^2/2m$, onde k_0 é o vector de onda térmico. Então, para uma película fina pode ser satisfeita a relação $d^2 \gg k_0^2$, que permite separar os movimentos transversal e longitudinal. Esta separação significa que seja aplicável a aproximação adiabática para graus de liberdades diferentes.

Ao analisar o resultado geral que reproduz os dados do artigo [27], concluímos que existe um caso especial que ainda não foi bastante investigado, sendo assim, permite evitar a necessidade de considerar todos aspectos provocados pelo termo não-adiabático do operador de Hamilton. Este caso refere-se ao filme de superfícies congruentes.

Então, seja $z_i = \xi(\vec{r})$ equação da superfície inferior da película e $z_s = \xi(\vec{r}) + d_0$ equação da superfície superior, d é a distância correspondente aos pontos com mesmo vector de posição \vec{r} que permanece constante em função a este vector, isto é:

$$d = z_s - z_i = d_0 + \xi(\vec{r}) - \xi(\vec{r}) = d_0 = \text{const.} \quad (4.2)$$

As superfícies que tem esta propriedade denominam-se congruentes. Estas obtêm-se devido ao deslocamento de todos os pontos por mesmo vector, pois a consideração citada refere-se ao deslocamento de superfície inferior " d_0 " ao longo do eixo-z. Tomando em conta a definição (4.2) para superfícies congruentes, obtêm-se:

$$\vec{\nabla} d = 0 \quad ; \quad \nabla^2 d = 0 \quad (4.3)$$

Também, filmes limitados por superfícies de género se chamam congruentes.

Substituindo as relações (4.3) nos termos não-diagonais do operador de Hamilton (3.15), conclui-se que estes se anulam para filmes em questão. Para além disso de (4.1) resulta:

$$u_e = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md^2} \left(\vec{\nabla} \xi \right)^2 \quad (4.4)$$

Consequentemente a equação de Schrödinger correspondente ao movimento longitudinal reduz-se a fórmula:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_n + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md^2} \left(\vec{\nabla} \xi \right)^2 \Psi_n = \left(E - \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md^2} \right) \Psi_n \quad (4.5)$$

Sublinha-se que só se refere a um filme de fronteiras congruentes.

O operador não adiabático é nulo independentemente da forma concreta da equação de superfície. Todos os efeitos ligados à forma da superfície contém o termo que corresponde a energia potencial. A energia eficaz é a mesma função das coordenadas x e y , multiplicada por um factor que além dos parâmetros fundamentais (m, d) só depende do número quântico "n" de quantificação dimensional.

Ao limite $d \rightarrow \infty$ corresponde ao cristal maciço em que o efeito de fronteira pode ser desprezível depois de omitir o termo infinitésimo $(\vec{\nabla} \xi / d)^2$. Esta análise vai de acordo com os resultados conhecidos e investigados, sendo:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \vec{\nabla} \Psi = \left(E - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \right) \Psi, \quad (4.6)$$

onde $k_z = \pi n/d$. Então, se vê que a equação (4.5) reduz-se a equação (4.6), que descreve o movimento quase-livre dos portadores, tal como deve ser em aproximação da massa eficaz. Assim, ao limite $\vec{\nabla} \xi \rightarrow 0$, corresponde a película plana, isto é:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Psi_n = \left(E - \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m} \right) \Psi_n. \quad (4.7)$$

De acordo com esta análise, obtém-se a relação argumentada em teoria dos efeitos dimensionais [12,18].

Foi sublinhado que a forma do filme influi sobre o espectro dos autovalores de energia por meio de energia potencial que é proporcional ao factor $(\vec{\nabla} \xi)^2$. Portanto, é necessário concretizar a forma explícita da função $\xi(\vec{r})$ a fim de obter informações detalhadas respectivas aos estados quânticos dos portadores. Antes, deve ser feita uma observação geral que se refere a função $\xi(\vec{r})$, do ponto de vista teórico. Esta função não se objecta que seja arbitrária, por isso, o problema pode ser reduzido a investigação do movimento bidimensional em campo arbitrário. Este problema foi investigado, embora existam particularidades ainda não estudadas até ao fim, como: a localização fraca dos portadores; efeito quântico de Hall; infiltração perto do ponto de localização; etc.

Portanto, para uma película de superfícies congruentes, se faz objecção praticamente inevitável de visão tecnológica. Seja a função $\xi(\vec{r})$ arbitrária, para obter um filme de fronteiras congruentes é necessário que seja aplicada a mesma função $\xi(\vec{r})$, à superfície superior.

Se a função $\xi(\vec{r})$ é arbitrária, então é pouco provável que possa, tecnologicamente, ser reproduzida a mesma função, pois, o método de espectroscopia electrónica de túnel [29], permite distinguir a estrutura atômica de superfície (em princípio). Portanto, mesmo que se usasse esta informação sobre a função $\xi(\vec{r})$ seria impossível dirigir por processo de produção de filme de modo que permitisse reproduzir a mesma forma para superfície superior. Então, sem excluir a importância de investigar o espectro energético e outras propriedades de filmes com as não-homogeneidades arbitrárias, que podem ser feitas na base de Hamiltoniano (3.13) e (4.1) a consideração posterior irá cingir-se só na película congruente, cuja superfície se descreve pela equação:

$$\xi_{(x+2ld)} = \xi_{(x)} = \begin{cases} \xi_0; |x| \leq a \\ -\frac{\xi_0}{b-a}(x-b); a < x \leq b \\ \frac{\xi_0}{b-a}(x+b); -b \leq x < -a \\ 0; -d \leq x < -b; b < x \leq d \end{cases} \quad (4.8)$$

De acordo com a equação (4.8), conclui-se que o modelo em estudo corresponde a um filme uniforme ao longo do eixo-y, e, ao eixo-x trata-se de um sistema periódico, de período "2d". Uma secção recta ao filme por plano zox, é representado na fig.4.

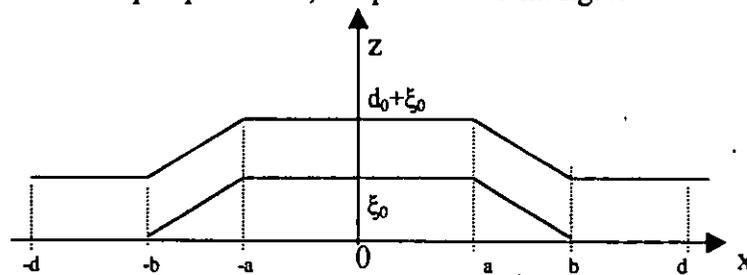


Fig.4 Substrato de filme uniforme no plano zox.

Considerando a forma explícita da função $\xi(\vec{r})$, isto é, a equação (4.8) e a definição de energia eficaz, obtém-se:

$$u_e = \begin{cases} 0, \text{ se } |x| \leq a \text{ ou } b \leq |x| \leq d \\ u_n, \text{ se } a < |x| \leq b \end{cases} \quad (4.9)$$

$$u_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2 m d_0^2} \operatorname{tg}^2 \varphi ; \quad \operatorname{tg} \varphi = \xi_0 / b-a \quad (4.10)$$

A escolha do modelo da película de superfícies congruentes, permite pelo menos do ponto de vista geral que a função $\xi(\vec{r})$ em princípio possa ser arbitrária. Entretanto, o que é importante é que o modelo teórico deve corresponder às possibilidades de tecnologia. Os métodos da tecnologia moderna sem dificuldades permitem produzir filmes de semicondutores e de metais de periodicidade unidimensional e, por sua vez, é mais cómodo controlar tecnologicamente o perfil linear do que qualquer outro. Portanto, para aproximar a consideração teórica às aplicações possíveis a investigação, limita-se a analisar um só modelo concreto que corresponde a forma do filme definida pela equação(4.8). Também, deve-se ter em conta que a análise teórica de um sistema simples dá possibilidades de verificar os métodos próprios, a fim de aplicá-los para investigar os sistemas mais complicados, sobretudo se forem conseguidos resultados perspectivos a menos que seja em relação aos modelos simples.

2. Discussão do modelo escolhido.

De facto, o estudo do modelo considerado tem um interesse independente; pois trata-se de um sistema de portadores de carga eléctrica que possui espectro energético bastante específico. Os autovalores de energia correspondentes ao movimento transversal, isto é, ao longo do eixo-z, formam espectro completamente discreto.

Então, conforme a terminologia habitual [27], tem-se a localização forte, pelo que a autofunção respectiva está localizada dentro do intervalo finito de coordenada "z".

O movimento ao longo do eixo-y, efectua-se de tal modo que os portadores de carga sejam livres; dado que o espectro referente ao grau de liberdade é contínuo e as autofunções são ondas planas que envolvem todo eixo-y.

Para tirar conclusões qualitativas sobre o movimento ao longo do eixo-x, é analisada a energia potencial, cujo gráfico abaixo em função de "x" apresenta a fig.5.

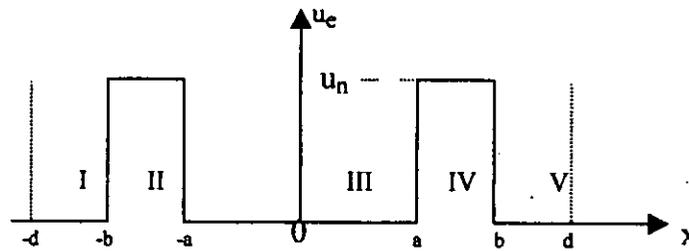


Fig.5 Energia potencial qualitativa.

É claro, que se tem dois intervalos de energia qualitativamente diferentes. Em que um deles corresponde a energia maior que a altura da barreira potencial " u_n ". Da mecânica quântica [14], sabe-se que autovalores de equação de Schrödinger criam espectro contínuo e as autofunções respectivas devem ser ondas planas modificadas por potencial periódico " $u_n(x)$ ". O outro intervalo refere-se às energias de $[0, u_n]$, onde cada poço rectangular [14] cria os níveis locais.

Os níveis criados por poços separados ampliam as sub-bandas devido a simetria de translação; a largura de uma sub-banda é proporcional à integral de descobrimento que é função exponencial de período " $2d$ ", como será demonstrado posteriormente. Portanto, o espectro consiste de bandas pouco largas, onde cada sub-banda de quantificação dimensional contém estados correspondentes ao movimento bidimensional e quase-unidimensional. Importa aqui salientar que por um lado a investigação deste espectro permite prever frequências próprias; intensidade de absorção de radiação electromagnética; analisar e interpretar os efeitos de ressonância.

Por outro lado, a anisotropia essencial do espectro terá de estimular todos fenómenos de transporte que apresentam por si interesse independente, sobretudo se se tomar em conta a possibilidade de dois mecanismos de transferência de carga e da energia. Um destes efectua-se por via de saltos electrónicos e o outro tem carácter habitual [15].

5. Dedução da equação secular.

De acordo com o parágrafo(4), a energia potencial " u_e " correspondente ao modelo mais simples, só depende da coordenada " x ". Portanto, a equação de Schrödinger admite a separação das variáveis " x " e " y ". Como o movimento ao longo do eixo- y é livre, a autofunção respectiva deve ser uma onda plana:

$$\Psi_n(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{L}} \cdot e^{iyt}, \Psi(x), \quad (5.1)$$

em que L é o comprimento do filme, k_y é o vector de onda.

A função $\Psi(x)$ depende do número quântico "n" e " k_y "; os índices correspondentes foram omitidos para simplificar as equações posteriores. Substituindo a equação (5.1) na equação de Schrödinger obtém-se:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2\Psi}{dx^2} + u_e \Psi = \varepsilon \Psi \quad , \quad (5.2)$$

$$\varepsilon = E - \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2 m d_0^2} - \frac{\hbar^2 k_y^2}{2 m} \quad . \quad (5.3)$$

A energia potencial é uma função lisa em pedaços. É necessário considerar separadamente todos os intervalos onde " u_e " seja derivável, de acordo com a fig.5. No entanto, considerando o primeiro intervalo, a equação (5.2) é transformada assim:

$$\frac{d^2\Psi_1}{dx^2} + k^2 \Psi_1 = 0 \quad , \quad (5.4)$$

$$k^2 = \frac{2m\varepsilon}{\hbar^2} \quad . \quad (5.5)$$

Então, a autofunção Ψ_1 possui a fórmula seguinte:

$$\Psi_1(x) = A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx} \quad . \quad (5.6)$$

A equação (5.6), inclui dois coeficientes A_1 e B_1 , pois, que a mesma fórmula de autofunção corresponde ao terceiro e quinto intervalos. Quanto ao segundo e quarto intervalos é necessário considerar dois momentos diferentes:

Um deles refere-se a energia $\varepsilon < u_n$, portanto, a solução geral da equação (5.2) é:

$$\Psi_{2/4}(x) = A_{2/4} e^{\chi x} + B_{2/4} e^{-\chi x} \quad , \quad (5.7)$$

$$\chi = \left[\frac{2m(u_n - \varepsilon)}{\hbar^2} \right]^{1/2} \quad . \quad (5.8)$$

Para obter a solução correspondente a energia $\varepsilon > u_n$, basta substituir na equação (5.7) o valor imaginário de χ definido pela equação (5.8).

Sabe-se [14], que a autofunção da equação de Schrödinger e sua derivada da primeira ordem são algumas funções contínuas. Segundo esta propriedade das autofunções obtém-se um sistema de

equações correspondentes a dez incógnitas A_i, B_i . As oito equações são deduzidas de acordo com a continuidade em cada um dos pontos “ $x = -b, -a, a, b$ ”.

Para $x = a$, as condições mencionadas possuem as fórmulas:

$$\Psi_3|_{x=a} = \Psi_4|_{x=a} \quad \text{e} \quad \Psi_3'|_{x=a} = \Psi_4'|_{x=a} \quad (5.9)$$

Depois de substituir as funções Ψ_3 e Ψ_4 que se determinam conforme as equações (5.6) e (5.7), obtém-se:

$$\begin{cases} A_3 e^{ika} + B_3 e^{-ika} = A_4 e^{xa} + B_4 e^{-xa} \\ ik(A_3 e^{ika} - B_3 e^{-ika}) = \chi(A_4 e^{xa} - B_4 e^{-xa}) \end{cases} \quad (5.10)$$

Por analogia deduzem-se as restantes equações, sendo conveniente apresentá-las em forma matricial, como:

$$\hat{V}(k, a) \begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \hat{V}(\chi, a) \begin{pmatrix} A_4 \\ B_4 \end{pmatrix}, \quad (5.11)$$

$$\hat{V}(k, \xi) = \begin{pmatrix} e^{ik\xi} & e^{-ik\xi} \\ ike^{ik\xi} & -ike^{-ik\xi} \end{pmatrix} \quad (5.12)$$

A matriz $\hat{V}(\chi, \xi)$, deduz-se da equação (5.12), se substituir χ em vez do parâmetro “ ik ”. Considerando a equação (5.11) exprimem-se os coeficientes “ A_{i-1}, B_{i-1} ” através dos coeficientes “ A_i, B_i ”, obtendo-se a seguinte equação:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = \hat{V}^{-1}(k, b) \hat{T}(\chi, -b, -a) \hat{T}(k, -a, a) \hat{T}(\chi, a, b) \hat{V}(k, b) \begin{pmatrix} A_5 \\ B_5 \end{pmatrix} \quad (5.13)$$

Nesta equação (5.13), são introduzidas as matrizes $\hat{T}(\chi, \xi, \eta); \hat{T}(k, \xi, \eta)$ que se denominam matrizes de transição ou de transferência [30]. Estas permitem simplificar a análise quantitativa de propagação das ondas e movimento das partículas em meio periódico. Cada matriz de transferência é expressa através das matrizes $\hat{V}(\chi, \xi), \hat{V}(k, \xi)$ de acordo com:

$$\hat{T}(\chi, \xi, \eta) = \hat{V}(\chi, \xi) \hat{V}^{-1}(\chi, \eta) \quad \text{e} \quad \hat{T}(k, \xi, \eta) = \hat{V}(k, \xi) \hat{V}^{-1}(k, \eta) \quad (5.14)$$

Aplicando as definições (5.12) e (5.14), facilmente se obtém as formas explícitas correspondentes às matrizes de transferência:

$$\hat{T}(\chi, -b, -a) = \hat{T}(\chi, a, b) = \frac{1}{\chi} \begin{pmatrix} \chi ch \chi \Delta & -sh \chi \Delta \\ -\chi^2 sh \chi \Delta & \chi ch \chi \Delta \end{pmatrix}, \quad (5.15)$$

$$\hat{T}(k, -b, -d) = \hat{T}(k, b, d) = \frac{1}{k} \begin{pmatrix} k \cos k\Delta_1 & -\text{sen}k\Delta_1 \\ k^2 \text{sen}k\Delta_1 & k \cos k\Delta_1 \end{pmatrix}, \quad (5.16)$$

$$\hat{T}(k, -a, a) = \frac{1}{k} \begin{pmatrix} k \cos 2ka & -\text{sen} 2ka \\ k^2 \text{sen} 2ka & k \cos 2ka \end{pmatrix}, \quad (5.17)$$

onde $b-a = \Delta$ é largura da barreira potencial e $d-b = \Delta_1$ é semi-largura do poço potencial.

Contudo, o sistema das equações (5.13) não está fechado, pelo que se obtêm duas equações em relação aos quatro coeficientes A_1, B_1, A_5 e B_5 ; para tal é necessário ter em conta a estrutura periódica.

Assim sendo, é válido o teorema de Floke [15]. De acordo com este teorema as soluções da equação diferencial da segunda ordem com coeficientes periódicos devem satisfazer as equações:

$$\Psi_1|_{x=-d} = e^{2iqd} \Psi_5|_{x=d} \quad \text{e} \quad \Psi_1'|_{x=-d} = e^{2iqd} \Psi_5'|_{x=d}, \quad (5.18)$$

onde "q" desempenha o papel de vector de onda e segundo as condições de Born-Karman[15], percorre os valores $\pi n/2Nd$, $n = (0, \pm 1, \dots, \pm N)$ e $2Nd$ é comprimento do filme ao longo do eixo-x.

As equações (5.18), permitem exprimir os coeficientes (A_5, B_5) em função dos coeficientes (A_1, B_1) , isto é:

$$\begin{pmatrix} A_5 \\ B_5 \end{pmatrix} = e^{-2iqd} \hat{V}^{-1}(k, d) \hat{V}(k, -d) \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \quad (5.19)$$

Combinando as equações (5.13) e (5.19), obtém-se:

$$\begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = e^{-2iqd} \hat{V}^{-1}(k, -b) \hat{T}(k, -b, -a) \hat{T}(k, -a, a) \hat{T}(k, b, d) \hat{V}(k, -d) \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix}. \quad (5.20)$$

Sabe-se que o sistema das equações lineares e homogéneas só pode possuir soluções se se anular o seu determinante:

$$\text{Det} \left\| \hat{T}(k, -b, -d) - e^{-2iqd} \hat{T}(k, -b, -a) \hat{T}(k, -a, a) \hat{T}(k, a, b) \hat{T}(k, b, d) \right\| = 0. \quad (5.21)$$

Substituindo as matrizes \hat{T} e omitindo as transformações intermediárias, apresentadas em anexo2, da equação (5.21) obtém-se a equação secular seguinte:

$$\left(ch2\chi\Delta \cos 2ka + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} sh2\chi\Delta \text{sen} 2ka \right) \cos 2k\Delta_1 + \left[\frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} sh2\chi\Delta \cos 2ka - \right. \\ \left. - \left(ch^2\chi\Delta - \frac{\chi^4 + k^4}{2\chi^2 k^2} sh^2\chi\Delta \right) \text{sen} 2ka \right] \text{sen} 2k\Delta_1 = \cos 2qd \quad (5.22)$$

A equação secular (5.22) corresponde ao intervalo de energia $[0, u_n]$, isto é, a energia menor que a altura da barreira potencial. Pelo que cada uma das soluções expressas em função de quase-vector de onda "q", determina sub-banda energética respectiva. Conforme a mecânica quântica [14], os autovalores que se encontram fora deste intervalo referem-se ao espectro contínuo.

Considerando a definição (5.8), verifica-se que a energia maior que " u_n ", a grandeza χ só possui valor imaginário. Então, para encontrar a equação secular é suficiente substituir na equação (5.22), o valor $i\chi$ em vez de χ .

Assim:

$$\left[\cos 2\chi\Delta \cos 2ka - \frac{\chi^2 + k^2}{2\chi k} \text{sen} 2\chi\Delta \text{sen} 2ka \right] \cos 2k\Delta_1 + \left[\left(\frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \right)^2 \text{sen} 2ka - \right. \\ \left. - \frac{\chi^2 + k^2}{2\chi k} \left(\text{sen} 2\chi\Delta \cos 2ka + \frac{\chi^2 + k^2}{2\chi k} \cos 2\chi\Delta \text{sen} 2ka \right) \text{sen} 2k\Delta_1 \right] = \cos 2qd \quad (5.23)$$

As equações (5.22) e (5.23) abordam totalmente o espectro energético dos electrões, uma vez que a primeira equação permite determinar os autovalores localizados dentro do intervalo $[0, u_n]$, enquanto que a segunda cobre o intervalo de u_n até ao infinito.

6. Soluções aproximadas da equação secular.

As equações (5.22) e (5.23) são exactas e enquadram-se ao modelo do filme em estudo. Entretanto, estas equações só podem ser resolvidas por via de cálculos numéricos, por isso é necessária a escolha das aproximações que permitam encontrar formas analíticas das soluções respectivas.

Contudo, antes de propormos o método aproximado que seja adequado ao problema, é preciso verificar que essas equações, em alguns casos de limite, podem ser reduzidas a forma conhecida e confirmar-se a sua validade.

Considerando a fig.5, em que sejam iguais os comprimentos dos poços potenciais, isto é, $a=d=b$, neste caso o limite correspondente ao sistema periódico dos poços rectangulares é conhecido como modelo de Kronig-Penney [31]. Portanto, se a equação (5.22) for correcta pode ser transformada numa forma equivalente à equação secular de Kronig-Penney (KP). Depois de efectuar esta substituição obtém-se:

$$ch\chi\Delta \cos 2ka + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} sh\chi\Delta \operatorname{sen} 2ka = \cos qd \quad (6.1)$$

Verifica-se que [31] a equação (6.1), exactamente coincide com a equação secular do modelo de Kronig-Penney. Mas ao limite $\xi_0 \rightarrow 0$ e $\Delta \rightarrow 0$, de fig.4 conclui-se que este limite corresponde ao filme com fronteiras planas e paralelas uma da outra. Recordemo-nos que do parágrafo(4), ao filme desta forma tem lugar o efeito de quantização dimensional, além disso o espectro energético consiste de sub-bandas de tal modo que cada uma das sub-bandas corresponde ao movimento livre ao longo dos eixos "x" e "y". Assim sendo, a lei de dispersão deve ser quadrática em função dos componentes do quase-vector de onda. Atendendo que a equação (5.23) refere-se ao espectro contínuo é necessário considerá-la, quando se pretende reproduzir resultados peculiares a filme ideal. Para tal usam-se dois procedimentos:

O primeiro corresponde ao limite $\Delta \rightarrow 0$, mas este só não permite restabelecer a forma plana das fronteiras, pois como se pode ver da fig.5, se obtém potencial correspondente ao modelo de Dirac [31], com uma diferença de energia potencial, permanecendo finita. Havendo, por isso mesmo, a necessidade de efectuar o segundo limite $\xi_0 \rightarrow 0$, por meio do qual se anula a barreira potencial que separa os poços vizinhos e restabelece a estrutura ideal do filme. Realizados os cálculos da equação (5.23) para segundo limite, obtém-se:

$$\cos 2kd = \cos 2qd \quad (6.2)$$

Daí resulta:

$$k = \pi p/2d + q \quad (6.3)$$

Em que “p” percorre os valores $(0, \pm 1, \pm 2, \dots)$. Quanto ao quase-vector de onda “q” varia dentro da primeira zona de Brilluin. Aplicando o esquema ampliado das zonas [15] por meio da relação:

$$k_x = \pi p / 2d + q, \quad (6.4)$$

introduz-se “x” componente do vector de onda que percorre todos os valores quase-discretos de “ $-\infty$ ” até “ $+\infty$ ”. As equações (5.5), (6.3) e (6.4) permitem estabelecer a forma explícita da lei de dispersão, de tal modo:

$$E(k_x, k_y) = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md_0^2} + \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2). \quad (6.5)$$

A equação (6.5) enquadra-se em teoria de EQD [12]. Portanto, analisados os dois casos particulares acima dados demonstram a validade da equação secular, representada pelas equações (5.22) e (5.23). Além demais a equação (5.22) pode ser transformada assim:

$$\begin{aligned} & \left[\cos 2ka + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sen} 2ka + e^{-2z\Delta} \left(\cos 2ka - \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sen} 2ka \right) \right] \cdot \\ & \cdot \left[\cos 2k\Delta_1 + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sen} 2k\Delta_1 + e^{-2z\Delta} \left(\cos 2k\Delta_1 - \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sen} 2k\Delta_1 \right) \right] = \\ & = 2e^{-2z\Delta} (\cos 2k(a - \Delta_1) + \cos 2qd) \end{aligned} \quad (6.6)$$

No intervalo $[0, u_n]$ de energia, alguns termos tem ordem exponencial, desprezando estes termos de ordem superior, obtém-se a aproximação de ordem zero da equação secular:

$$\left(\cos 2ka + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sen} 2ka \right) \cdot \left(\cos 2k\Delta_1 + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sen} 2k\Delta_1 \right) = 0 \quad (6.7)$$

Entretanto, a equação (6.7) é satisfeita se pelo menos um dos factores for igual a zero no primeiro membro. É de salientar que as equações obtidas deste modo são perfeitamente investigadas em (MQ). Conforme [14] cada uma das equações determina os níveis estacionários respectivos ao poço rectangular de profundidade finita. Então, a aproximação de ordem zero corresponde aos dois poços independentes, que têm a mesma profundidade e as larguras “2a” e “2 Δ_1 ” em geral diferentes.

Se se desprezar um só termo de ordem exponencial, isto é, o segundo membro da equação (6.6), obtém-se duas equações separadas análogas à equação (6.7).

Quanto aos níveis energéticos da MQ [32], sabe-se que o número N destes níveis é determinado pela relação:

$$N = \left[\left(\frac{2mu}{\hbar^2} \right)^2 \frac{2a}{\pi} \right] + 1, \quad (6.8)$$

onde "u" é a profundidade do poço, "a" é a largura do poço. Segundo as designações feitas na fórmula (6.3), os números N_1 e N_2 referidos em cada um dos poços são:

$$N_1 = \left[\frac{4n\xi_0 a}{d_0 \Delta} \right] + 1 \quad e \quad N_2 = \left[\frac{4n\xi_0 \Delta_1}{d_0 \Delta} \right] + 1. \quad (6.9)$$

Porém pode se ver que além do número quântico de quantização transversal "n", os números N_1 e N_2 dependem dos parâmetros geométricos " ξ_0 , d_0 , Δ_1 e Δ "; cujos valores só se limitam a possibilidades tecnológicas. Os parâmetros " d_0 , a e Δ_1 ", devido a sua orientação em relação a direcção de crescimento, são mais admissíveis ao controle tecnológico que os parâmetros " ξ_0 e Δ " correspondentes às partes inclinadas do filme. Em cada aspecto devem ser distinguidos três hipóteses respectivas aos números N_1 e N_2 . A primeira refere-se às relações $N_1 \gg 1$ e $N_2 \gg 1$; a segunda só tem lugar quando um só número dos níveis, digamos $N_1 \gg 1$ e a terceira hipótese corresponde aos casos N_1 e N_2 , sejam comparáveis com o número "1". Portanto, na primeira bem como na segunda hipótese ambos os poços ou pelo menos um possui estrutura quase-discreta dos níveis energéticos com a distribuição quase-contínua de energia [32]. Então, só o último caso corresponde ao filme quântico, o espectro proporcional à nossa perspectiva em estudo nesta investigação.

Consequentemente a consideração posterior irá debruçar os casos em que $N_1 \geq 1$ e $N_2 \geq 1$. Se as equações (6.9) incluem os quatros parâmetros geométricos, então sempre existe um espaço para que a tecnologia possa garantir a validade destas restrições.

Recordando a aproximação de ordem zero expressa pela equação (6.7), apresentamos a estrutura qualitativa dos níveis energéticos, da seguinte forma:

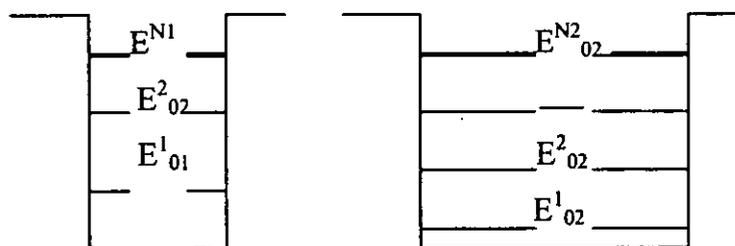


Fig.6 Estrutura qualitativa dos níveis de energia.

As energias E_{0i}^j dependem da profundidade “u” e da largura do poço. Existem tabelas que incluem os autovalores da energia em função dos parâmetros acima mencionados. Para a realização dos cálculos numéricos precisa-se de conhecer estes autovalores que os reduzimos a tabela1, aproveitando os dados adoptados de [32,33].

Tabela1. Autovalores de energia [32,33], * corresponde aos níveis ímpares.

$\left(\frac{2mu_0}{\hbar^2}\right)^{1/2} \cdot a$	1,0	1,5	2,0	2,5	3,0	3,5	4,0
$\left(\frac{2mE_{0i}}{\hbar^2}\right)^{1/2} \cdot a$	0,628	0,944	1,038 1,886*	1,223 2,237*	1,318 2,675*	1,432 2,823*	3,374 1,477 2,892* 3,847

$$tgka = \frac{\chi}{k}, \text{ equação respectiva ao estado par.}$$

$$ctgka = -\frac{\chi}{k}, \text{ equação respectiva ao estado ímpar.}$$

As correcções aos autovalores E_{0i}^j são encontrados por meio da teoria das perturbações com respeito ao espectro discreto. Como regra geral esta teoria é aplicada directamente à equação de Schrödinger, no entanto a equação (6.6) é equivalente à equação de onda. Assim nesta equação (6.6) também são aplicáveis os métodos elaborados para a equação de Schrödinger, mas em princípio é necessário especificar a forma explícita de perturbação. Comparando a equação imperturbada (6.7) com a equação exacta (6.6), conclui-se que desempenham o papel de perturbação todos os aditivos que incluem os factores exponenciais $e^{-2x\Delta}$. A origem destes factores é evidente, uma vez que a aproximação dada pela equação (6.7) em forma implícita baseia-se na posição de que as paredes do

poço sejam intransitáveis, pois, a espessura deste tende ao infinito. Entretanto, cada uma das paredes na realidade tem espessura finita e é determinada pelo parâmetro "Δ". Sabe-se que [14], dentro da barreira potencial a função de onda não se anula e reduz-se a sobreposição das ondas passadas e reflectidas, porém cada uma possui o comportamento exponencial, que explica o surgimento dos factores em questão. Assim, conclui-se que a perturbação é responsável pela transferência parcial das barreiras que separam os poços e as células vizinhas.

Podemos verificar que os factores exponenciais que se encontram em equação (6.6) estimulam os processos qualitativamente diferentes, com efeito, desprezando o segundo membro obtém-se a equação que é separada em duas independentes, além demais, cada uma delas corresponderá a um só poço potencial.

A equação correspondente ao primeiro poço escreve-se:

$$\cos 2ka + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sen} 2ka + e^{-2\chi\Delta} \left(\cos 2ka - \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sen} 2ka \right) = 0 \quad (6.10)$$

A equação análoga tem lugar em relação ao outro poço; a propriedade da equação (6.6), permiti-nos concluir que o termo de perturbação que se encontra na parte direita estabelece uma ligação entre os poços dentro de uma célula elementar (primeiro aditivo) e entre as células elementares (segundo aditivo). Sabe-se que o processo microscópico respectivo a ligação em questão, se reduz ao efeito de túnel, por meio do qual a partícula efectua transições de um poço para outro vizinho.

Interpretado o segundo membro da equação (6.6), podemos atribuir o senso físico aos factores exponenciais do primeiro membro. Vemos que os factores observados em (6.6) são responsáveis pela modificação do espectro devido a transferência parcial das paredes dos poços.

A análise faz crer que desprezando ampliação dos níveis energéticos em subbandas consegue-se reduzir a equação (6.6), para a forma correspondente aos poços independentes, cujas paredes tornam-se semi-permeáveis devido a sua transferência parcial. Os gráficos qualitativos de energia são dados pela fig.7 (estes foram deslocados em direcção vertical para acentuar o facto de que se trata de poços independentes).

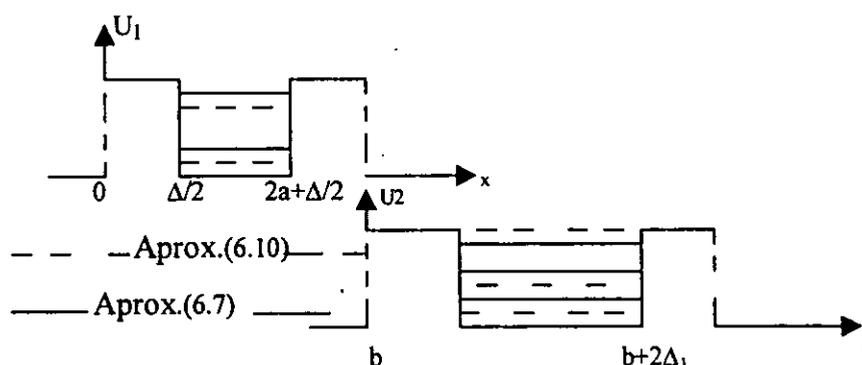


Fig. 7 Esquema qualitativo dos níveis estacionários em poços independentes.

Em cada um dos gráficos de forma qualitativa são dados os respectivos níveis, a aproximação expressa pela equação (6.7) e os níveis modificados. Conforme a aproximação (6.10) para poder encontrar novas posições dos níveis energéticos modificados por transferência das paredes, aplicamos o método que permite controlar as aproximações e identificar cada uma das aproximações consecutivas em termos da teoria de perturbação. Como este método será aplicado para encontrar soluções aproximadas a equação (6.6), introduzimos as funções $G_1(E)$ e $G_0(E)$, que são definidas por :

$$G_1(E) = \frac{G_0(E)}{1 + G_0(E)e^{-2\chi\Delta}} \quad (6.11)$$

$$G_0(E) = \frac{2\chi k \operatorname{ctg} 2ka - (\chi^2 - k^2)}{2\chi k \operatorname{ctg} 2ka + (\chi^2 - k^2)} \quad (6.12)$$

A partir da definição (6.12), observamos que a equação (6.10) é equivalente a:

$$1 + G_0(E)e^{-2\chi\Delta} = 0 \quad (6.13)$$

Então, as soluções da equação (6.10) determinam os pólos da grandeza $G_1(E)$, definida em função da energia "E". Por sua vez, da equação (6.7) e definição (6.12), concluímos que as soluções imperturbadas correspondem aos pólos da função $G_0(E)$; com efeito, o numerador desta função é finito para todos os "ka" que são diferentes de " πn " onde $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Portanto, os pólos só aparecem em pontos correspondentes aos zeros do denominador. No entanto, anulando o denominador da função $G_0(E)$ obtém-se a equação (6.7), assim se confirma a conclusão tirada acima

em relação aos pólos da função $G_0(E)$. Então, o denominador é função par em relação ao parâmetro "k". A equação (6.7) possui "N" soluções correspondentes ao intervalo de energia $[0, U_n]$; por isso, em relação ao numerador é válida a aproximação polinomial, isto é, o denominador é proporcional ao produto $(k^2 - k_1^2)(k^2 - k_2^2) \dots (k^2 - k_N^2)$. Como " $k^2 \sim E$ ", este produto pode ser expresso em função de energia de tal modo que $(E - E_{01})(E - E_{02}) \dots (E - E_{0N})$. Daí conclui-se que deve ser válida a representação:

$$G_0(E) \sim [(E - E_{01})(E - E_{02}) \dots (E - E_{0N})]^{-1} \quad (6.14)$$

Se for aplicado o teorema de decomposição por frações simples da relação (6.14), obtém-se:

$$G_0(E) = \sum_{r=1}^N \frac{A_{r0}}{E - E_{r0}} \quad (6.15)$$

Os coeficientes " A_r ", são encontrados igualando definições (6.12) - (6.15) e integrando ao longo do contorno infinitesimal dado na fig.8.

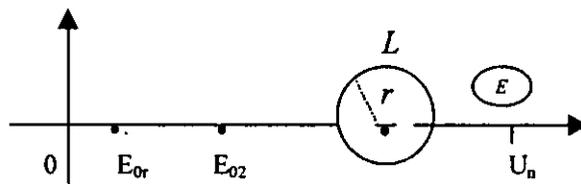


Fig.8 Campo de contorno infinitesimal.

Usando o teorema de Cauchy[34], obtém-se:

$$A_{r0} = \left\{ \frac{d}{dk} \left[\frac{\cos 2ka + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sen} 2ka}{\cos 2ka - \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \operatorname{sen} 2ka} \right] \frac{dk}{dE} \right\}_{E=E_{r0}}^{-1} \quad (6.16)$$

substituindo $E = E_{r0}$, tendo em conta a equação (6.8) depois de calcular as derivadas resulta que:

$$A_{r0} = - \frac{8E_{r0} \chi_r^3 k_r \operatorname{ctg} 2k_r a}{(\chi_r^2 + k_r^2)^2 (1 + \chi_r a)} \quad (6.17)$$

Considerando os cálculos aproximados e as equações (6.13), (6.15) e (6.17) obtém-se a equação mais cômoda seguinte:

$$1 - \sum_{r=0}^N \frac{8E_{r0} \chi_r^3 k_r e^{-2\chi_r \Delta} \operatorname{ctg} 2k_r a}{(E - E_{r0})(\chi_r^2 + k_r^2)^2 (1 + \chi_r a)} = 0. \quad (6.18)$$

O factor $e^{-2\chi \Delta}$ foi inserido dentro da soma, porque cada um dos aditivos tem um valor essencial em pontos correspondentes a energia "E_{r0}". Então, a equação (6.18) pode ser resolvida por via das aproximações consecutivas, pois, inclui a perturbação proporcional ao factor $e^{-2\chi \Delta}$. Os cálculos directos permitem verificar que em relação a energia, a resolução da equação (6.18) conduz a série peculiar à teoria de perturbação. Assim sendo, a correcção da primeira ordem tem a forma:

$$E_r = E_{r0} + \frac{8E_{r0} \chi_r^3 k_r e^{-2\chi_r \Delta} \operatorname{ctg} 2k_r a}{(\chi_r^2 + k_r^2)^2 (1 + \chi_r a)} \quad (6.19)$$

A primeira correcção é proporcional ao factor $e^{-2\chi \Delta}$ que tem senso de transferência das paredes, como a equação (6.10) foi modificada para fórmula (6.18), adequada à teoria de perturbação, então, pode-se dizer que a correcção da segunda ordem deve ser proporcional a $e^{-4\chi \Delta}$. Com efeito, uma partícula entrando dentro da barreira potencial deve percorrê-la duas vezes antes de regressar ao poço.

O caminho percorrido dentro da barreira torna-se duas vezes maior, isto origina o factor $e^{-4\chi \Delta}$. Esta conclusão vai de acordo com a teoria de perturbação, pelo que a correcção da segunda ordem é proporcional ao factor em causa. Então, esta correcção é pelo menos de "e²" vezes menor que a correcção da primeira ordem, determinada pela equação (6.19).

A análise limita-se a consideração de aproximação linear em relação as soluções da equação (6.10). Estabelecidas as soluções aproximadas desta equação, podem ser encontradas as soluções da equação secular (6.6). Por analogia à relação (6.11) introduzimos a função G(E) em relação a equação (6.6) da seguinte maneira:

$$G(E) = \frac{G_1(E)G_2(E)}{1 - G_1(E)G_2(E)\delta(E)} \quad (6.20)$$

onde G₁(E) e G₂(E) são definidos pela equação (6.11) e função δ(E) é:

$$\delta(E) = 2e^{-2\chi d} (\cos 2k(a - \Delta_1) \cos 2qd) \cdot \left\{ \left(\cos 2ka - \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \sin 2ka \right) \left(\cos 2k\Delta_1 - \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \sin 2k\Delta_1 \right) \right\}^{-1} \quad (6.21)$$

As soluções da equação (6.6) coincidem com os pólos da função $G(E)$ que se determinam pela equação:

$$1 - G_1(E)G_2(E)\delta(E) = 0. \quad (6.22)$$

A cada uma das funções $G_1(E)$ próximo dos seus pólos são apresentadas de modo análogo a equação (6.15), isto é:

$$G_1(E) = \sum_{r=1}^{N_1} \frac{A_{r1}}{E - E_{r1}}. \quad (6.23)$$

Onde " E_{ri} " são soluções exactas da equação (6.10), estas energias são determinadas pela equação (6.15), em aproximação principal da teoria de perturbação. Portanto, nesta aproximação os coeficientes " A_{ri} ", são escritos de acordo com a equação (6.17), isto é, devem ter a ordem zero em relação a perturbação, para não superar a precisão das séries da teoria de perturbação. Considerando esta observação a equação (6.22) é transformada em:

$$1 - \sum_{r=1}^{N_1} \sum_{p=1}^{N_2} \frac{A_{r01} A_{p02} \delta_{rp}}{(E - E_{r1})(E - E_{p2})} = 0, \quad (6.24)$$

δ_{rp} é uma função que se obtém da equação (6.21), depois de simetrizá-la e aplicando a equação (6.7), a sua transformação é:

$$\delta_{rp} = \frac{1}{2} e^{-(\chi_r + \chi_p)k} \left[1 + \operatorname{tg} 2k_r \operatorname{atg} 2k_p \Delta_1 + \frac{\cos 2qd}{\cos 2k_r \cos 2k_p \Delta_1} \right]. \quad (6.25)$$

A resolução da equação (6.24), faz-se em quadro da teoria de perturbação, assegurando só os coeficientes lineares em relação a perturbação δ_{rp} , havendo a necessidade de distinguir dois casos qualitativamente diferentes.

O primeiro dos quais refere-se aos níveis não degenerados dos poços independentes, isto é, supõe-se que $E_{r01} \neq E_{p02}$ para todos os "r" e "p". Para encontrar a correcção relativa a energia " E_r ", o aditivo correspondente separa-se da soma dada na equação (6.24) e resulta:

$$1 - \frac{A_{r01}}{E - E_{r1}} \sum_{p=1}^{N_2} \frac{A_{p02} \delta_{rp}}{E - E_{p2}} - \sum_n' \sum_p \frac{A_{n01} A_{p02} \delta_{np}}{(E - E_{n1})(E - E_{p2})} = 0, \quad (6.26)$$

onde Σ' significa que desta soma destaca-se um aditivo para " $n = r$ ". O último termo da equação (6.26) origina a correcção da segunda ordem e o penúltimo aditivo é responsável pela correcção da ordem linear, consequentemente tem-se:

$$\tilde{E}_{r1} = E_{r1} + \sum_{p=1}^{N_2} \frac{A_{r01} A_{p02} \delta_{rp}}{E_{r1} - E_{p2}}, \quad (6.27)$$

$$\tilde{E}_{p2} = E_{p2} + \sum_{r=1}^{N_1} \frac{A_{r01} A_{p02} \delta_{rp}}{E_{p2} - E_{r1}}. \quad (6.28)$$

Entretanto, os níveis " E_{r01} " e " E_{p02} " podem ser degenerados. A degeneração sistemática sucede quando as larguras dos poços são iguais entre si, " $a = \Delta_1$ ". Mas também esta degeneração pode ser accidental quando os parâmetros " a " e " Δ_1 " satisfazem a condição $\Delta_1 = a + \pi n / k_r$; onde " n " é um número inteiro e " k_r " é o vector de onda correspondente a energia dos níveis degenerados. No entanto, em ambos casos o nível " E_{r0} " é duplamente degenerado. Se o nível for degenerado em equação (6.24) deve-se separar apenas dois aditivos, obtendo-se:

$$1 - \frac{A_{r01}^2 \delta_{r1}}{(E - E_r)^2} = 0. \quad (6.29)$$

Daí resulta que os autovalores de energia respectiva aos níveis degenerados são:

$$E_{r1} = E_r + A_{r01} \sqrt{\delta_{rr}}, \quad (6.30)$$

$$E_{r2} = E_r - A_{r01} \sqrt{\delta_{rr}}. \quad (6.31)$$

Conforme as relações (6.30) e (6.31) conclui-se que os níveis degenerados se tornam desintegrados devido as transições do electrão de uma célula para outra.

Substituindo as fórmulas (6.17), (6.19) em relações (6.27) e (6.28) obtém-se os seguintes resultados finais:

$$\tilde{E}_r = E_{r0} + \Delta E_r + I_r (1 - \cos 2qd) \quad (6.32)$$

$$\tilde{E}_p = E_{p0} + \Delta E_p + I_p (1 - \cos 2qd) \quad (6.33)$$

Nestas relações E_{r0} e E_{p0} determinam por si as aproximações de ordem zero, ΔE_r e ΔE_p correspondem ao deslocamento dos níveis devido a transferência das barreiras e efeito de túnel. De acordo com a consideração feita em aproximação linear em relação a ΔE_r e ΔE_p obtém-se as formas explícitas:

$$\Delta E_r = -\frac{4E_{r0}\chi_r^2(\chi_r^2 - k_r^2)}{(\chi_r^2 + k_r^2)^2(1 + \chi_r a)} \cdot e^{-2\chi_r \Delta} + \sum_{p=1}^{N_2} \frac{16E_{r0}E_{p0}\chi_r^2\chi_p^2(k_r^2 k_p^2 + \chi_r^2 \chi_p^2)}{(\chi_r^2 + k_r^2)^2(1 + \chi_r a)(\chi_p^2 + k_p^2)^2(1 + \chi_p a)} \cdot \frac{e^{-(\chi_r + \chi_p)\Delta}}{E_{r0} - E_{p0}} \quad (6.34)$$

$$\Delta E_p = -\frac{4E_{p0}\chi_p^2(\chi_p^2 - k_p^2)}{(\chi_p^2 + k_p^2)^2(1 + \chi_p a)} \cdot e^{-2\chi_p \Delta} + \sum_{r=1}^{N_1} \frac{16E_{r0}E_{p0}\chi_r^2\chi_p^2(k_r^2 k_p^2 + \chi_r^2 \chi_p^2)}{(\chi_r^2 + k_r^2)^2(1 + \chi_r a)(\chi_p^2 + k_p^2)^2(1 + \chi_p a)} \cdot \frac{e^{-(\chi_r + \chi_p)\Delta}}{E_{p0} - E_{r0}} \quad (6.35)$$

Os últimos aditivos das fórmulas (6.32) e (6.33) correspondem a desintegração dos níveis em sub-bandas energéticas, devido ao efeito de túnel e simetria de translação do filme ao longo do eixo-x. Os parâmetros " I_r " e " I_p " determinam a semi-largura da sub-banda originada pelo nível "r" ou "p" respectivamente:

$$I_r = \sum_{p=1}^{N_2} \frac{8E_{r0}E_{p0}\chi_r^2\chi_p^2 e^{-(\chi_r + \chi_p)\Delta}}{(\chi_r^2 + k_r^2)(1 + \chi_r a)(\chi_p^2 + k_p^2)(1 + \chi_p a)(E_{p0} - E_{r0})} \quad (6.36)$$

$$I_p = \sum_{r=1}^{N_1} \frac{8E_{r0}E_{p0}\chi_r^2\chi_p^2 e^{-(\chi_r + \chi_p)\Delta}}{(\chi_r^2 + k_r^2)(1 + \chi_r a)(\chi_p^2 + k_p^2)(1 + \chi_p a)(E_{r0} - E_{p0})} \quad (6.37)$$

No que concerne aos níveis degenerados das fórmulas (6.17), (6.19), (6.30) e (6.31) resulta:

$$\tilde{E}_{r1} = E_{r0} + \Delta E_{rd} - I_{rd}(1 - \cos qd) \quad , \quad (6.38)$$

$$\tilde{E}_{r2} = E_{r0} + \Delta E_{rd} + I_{rd}(1 - \cos qd) \quad , \quad (6.39)$$

$$\Delta E_{r1/2} = \frac{4E_{r0}\chi_r^2(\chi_r^2 - k_r^2) \cdot e^{-2x_r\Delta}}{(\chi_r^2 + k_r^2)^2(1 + \chi_r a)} + \frac{4E_{r0}\chi_r^2}{(\chi_r^2 + k_r^2)(1 + \chi_r a)} \cdot e^{-x_r\Delta} \quad , \quad (6.40)$$

$$I_{rd} = \frac{4E_{r0}\chi_r^2}{(\chi_r^2 + k_r^2)(1 + \chi_r a)} \cdot e^{-x_r\Delta} \quad . \quad (6.41)$$

Nota-se que o primeiro aditivo da fórmula (6.40) pode ser desprezado devido a sua ordem em comparação com o segundo aditivo desta relação.

7. Discussão dos resultados.

De acordo com os resultados principais deste trabalho expressos pelas fórmulas (6.5), (6.32) e (6.33) constata-se que espectro energético dos electrões dentro do intervalo de energia $[0, u_n]$ consiste de sub-bandas separadas. Em aproximação da segunda correcção da teoria de perturbação especificada no parágrafo(6), a lei de dispersão é proporcional à função "cos2qd"(para o caso não-degenerada) e possui a forma explícita seguinte:

$$E_n(k_y, q) = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2md_0^2} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m} + E_{r(p)0} + \Delta E_{r(p)} + I_{r(p)}(1 - \cos 2qd) \quad , \quad (7.1)$$

que resulta da definição (5.3) e das equações (6.32) e (6.33).

Sabe-se que o último aditivo da fórmula (7.1) é responsável sobre o movimento de translação ao longo do eixo-x do filme. Observa-se que a estrutura analítica deste aditivo é idêntica àquela que se obtém em termo do método de ligação forte conhecido da teoria dos sólidos[15]. Por isso o método que foi aplicado para resolver o problema do espectro energético pode ser interpretado como uma das versões da teoria de ligação forte, correspondente a aproximação dos vizinhos mais

próximos. No entanto, tem lugar uma particularidade fundamental que se refere a semi-largura "T" da banda energética. De facto em teoria dos sólidos bem como na maneira de tratar as sub-bandas, este parâmetro determina-se em termos das integrais de descobrimento. Como a energia potencial e as funções de Wannier [15,30], que se usam para os objectivos do método da ligação forte são desconhecidos, a grandeza "T" considera-se como se fosse parâmetro de teoria. Ao contrário disso o nosso tratamento permite encontrar este parâmetro em função explícita dos factores definidos pela forma geométrica do filme e por este meio tirar conclusões quantitativas que se referem a posição e semi-largura das sub-bandas. Ao estabelecer a equivalência entre o método deste trabalho e a teoria da ligação forte abre-se a possibilidade de tratar filmes de superfícies congruentes (FSC) de forma mais geral de superfície, incluindo o relevo bidimensional. Portanto, em relação a lei de dispersão logo pode ser escrita a equação (7.1). Quanto à posição da sub-banda e sua semi-largura deve ser resolvida a equação (4.5). Se for conhecida a forma geométrica do filme, o problema pode ser reduzido para os métodos tradicionais da MQ.

A lei de dispersão (7.1) confirma as previsões preliminares feitas no parágrafo(4), sobre o comportamento das propriedades físicas do FSC. De fórmula (7.1) observa-se que tem lugar a anisotropia extraordinária do espectro dos portadores, pois, um portador efectua o movimento quase-livre ao longo do eixo-y e realiza o movimento respectivo à banda estreita ao longo do eixo-x.

Por isso, espera-se observar a anisotropia essencial de todas as propriedades determinadas em termos da lei de dispersão. Em primeiro lugar trata-se de susceptibilidade magnética (componente de Paierls [15]) e eléctrica, coeficientes cinéticos tais como: condutibilidade eléctrica, coeficiente diferencial da força termoeléctromotriz que são importantes de ponto de vista de transformação de energia. Para além disso, presume-se que devido às transições entre as sub-bandas varia o comportamento do coeficiente de absorção de luz dentro do intervalo das energias correspondente a extremidade de absorção. A anisotropia do espectro estimula a anisotropia das autofunções respectivas, daí conclui-se que o coeficiente de absorção deve depender também da polarização da luz.

Tanto as conclusões como as propostas acima feitas, para generalizar o método de investigar o espectro electrónico de um filme qualquer com simetria periódica, baseiam-se essencialmente em resolução das equações (5.2) e (5.23). No entanto, a solução da equação (5.23) foi obtida por via dos

métodos aproximados. Por isso, é importante verificar o resultado expresso pela equação (7.1) aplicando resolução exacta da equação secular. A ideia desta resolução é simples e reduz-se aos cálculos numéricos do primeiro membro da equação (5.22) ou (5.23), em função da energia adimensional normalizada de tal modo que " $x = E / u_n$ ".

O programa dos cálculos juntamente com os resultados numéricos podem se ver em anexos (3 e 4), respectivamente. Esses cálculos foram feitos para valores razoáveis dos parâmetros geométricos dos filmes. Depois de calcular o primeiro membro da equação (5.22) torna-se possível a sua resolução gráfica, apresentada pela fig.9.

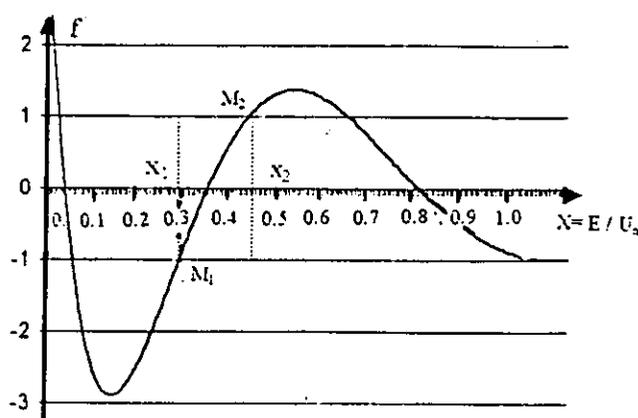


Fig.9 Espectro energético adimensional normalizada.

Observa-se que o segundo membro da equação (5.22) varia dentro do intervalo $[-1,1]$. Daí conclui-se que as soluções devem ser localizadas neste intervalo e para além disso os pontos de intersecção do gráfico com as rectas " $f = -1$ " e " $f = 1$ " determinam as energias respectivas no fundo e tecto da sub-banda (veja os pontos M_1 e M_2 da fig.9). No entanto, dentro do intervalo $[x_1, x_2]$ de acordo com a fig.9, o primeiro membro da equação (5.23) é função linear de energia. Este resultado permiti-nos concluir que a solução da equação (5.23) em aproximação fundamental depende linearmente de " $\cos 2qd$ ". Por este meio os cálculos numéricos confirmam a lei de dispersão (7.1) e todas as conclusões que resultam desta fórmula, isto é, a discussão acima feita. Chama-se atenção ao facto de o programa dos cálculos numéricos permitir realizá-los em relação aos parâmetros arbitrários do filme e encontrar a posição de sub-banda da escala energética, bem como a sua semi-largura. Quanto as investigações dos efeitos concretos a forma aproximada (7.1) é mais preferível pois, assegura a consideração analítica até certa etapa que depende do efeito em estudo.

Sublinha-se que os resultados dos parágrafos (4-6) se referem directamente aos electrões de banda de condução do semiconductor ou metal. Todavia, para as aplicações práticas é importante que seja conhecida a modificação do espectro das lacunas electrónicas. Entretanto, este problema é mais difícil pois, dum modo geral a banda de valência dos semicondutores é degenerada. Por isso a função de onda em equação (5.2) torna-se policomponente e a equação de Schödinger só pode ser resolvida por via dos métodos numéricos.

No entanto, segundo o artigo [35] para assegurar a investigação pelo menos semi-quantitativa a degeneração pode ser considerada como se fosse desprezível. Ao desprezar a degeneração se obtém equação semelhante a (5.2), para cada um dos componentes da função de onda.

Portanto, em relação as lacunas electrónicas tornam-se válidos todos os resultados deste trabalho, com duas alterações apenas. Primeiro, faz-se a substituição da massa eficaz da lacuna em vez da massa do electrão. Segundo, varia o sentido da contagem da energia.

Tomando em conta esta observação pode ser reproduzido o espectro do FSC constituído dum semiconductor bipolar. Este espectro está apresentado na fig10, onde E_c e E_v são energias correspondentes as extremidades das bandas do semiconductor maciço. Assim sendo, observa-se que a aplicação do FSC permite influir de modo controlado sobre a largura de banda proibida e estrutura dos estados estacionários que ficam dentro desta banda.

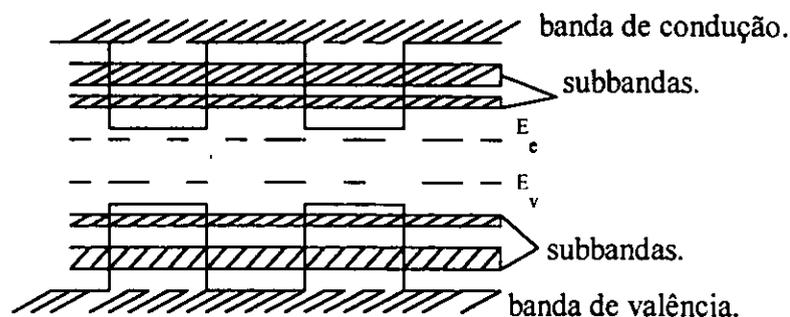


Fig.10 Espectro energético do FSC, dum semiconductor bipolar.

8. Conclusão.

1) As investigações bibliográficas realizadas permitiram verificar que existe um tipo específico de filmes quânticos (FSC). Este tipo de filme possui Hamiltoniano que não inclui o operador não adiabático.

- 2) Nos filmes deste tipo separam-se os movimentos transversal e longitudinal.
- 3) Foi estabelecida a forma geral de energia potencial eficaz correspondente ao movimento longitudinal. A energia eficaz exprime-se em termos da forma geométrica do filme e é sensível em relação aos parâmetros geométricos.
- 4) Das soluções aproximadas de equação secular referente a um modelo do filme resulta que a parte baixa do espectro dos portadores consiste de sub-bandas.
- 5) Conclui-se que a posição do centro de cada uma das sub-bandas bem como as suas semi-larguras possuem a ordem exponencial em função da espessura das barreiras.
- 6) Observa-se que os parâmetros das sub-bandas podem ser alterados e controlados por via dos parâmetros geométricos do filme.
- 7) Conclui-se que os resultados deste modelo podem ser generalizados em relação aos FSC de forma arbitrária mas periódica, pois, o método de solução da equação secular reduz-se a uma das versões da teoria de ligação forte.

9. Recomendações.

Recomenda-se:

- 1) Introduzir os FSC nas tecnologias, devido a possibilidade de prever definitivamente o espectro dos portadores e por causa da simplicidade relativa de criar os filmes deste tipo.
- 2) Usar os FSC para criar as sub-redes planares.
- 3) Continuar a investigar os FSC do ponto de vista dos efeitos concretos tais como efeitos fotoelétricos; fenómenos de transporte.

10. Referências Bibliográficas.

- [1]. Zangwill A. **Physics of Surfaces**. Cambr. Univ. Press. 1988, p438.
- [2]. Gibbs J.W. **The Equilibrium of Meterogeneous Substances**. Collect. Works v.1, 1948, New Haven, Jale.
- [3]. Scheibken J., Germer, Martmann. **Low energy eléctron difraction (LEED)**. Rev.Sci. Inst.,1960, v.31, p112.
- [4]. Pokrovsky V.L., Talapov A.L. **Theory of incommensurate crystal**. 1984, London, Marwood.
- [5]. Jin B.Y., Ketterson J.B. **Advances in Physics**. 1989, v.38, N3,p189.
- [6]. Schmitt-Rint S., Chemla D.S., Miller D.A. **Advances in Physics**. 1989, v.38,N2, p89.
- [7]. Cingolani R., Ploog K. **Advances in Physics**. 1991, v.40,N5, p535.
- [8]. Yoffe A.D. **Advances in Physics**. 1993, v.42,N2, p173.
- [9]. Jain J.K. **Advances in Physics**. 1992, v.41,N2, p105.
- [10]. Ando T., Fauler A., Stern F. **Eléctron properties of Two-dimensional systems**. 1982, New York, Perg. Press.
- [11]. Coutts T.J., Meakin J.D. **Current Topic in Photovoltaics**. 1985, New York, Acad. Press.
- [12]. Lifchitz I.M., Kosevich A.K., Dokl, Akad. Nauk SSSR, 1953, v.91, p795.
- [13]. Kelly M.J., Nicholas R.J. **Rep. Prog. Physics**. 1985, v.48, p1702.
- [14]. Landau L., Lifchitz E. **Mecânica Quântica**. 1985, Moskov, Mir, p294.
- [15]. Ziman J.M. **Principles of the Theory of solids**. 1972, Cambr. Univ. Press.
- [16]. Levdin D.L. **The Tamm surface**. 1972,Toronto.
- [17]. Lifchitz I.M., Kaganov M.I., Kosevich A.K. **Eléctron Theory of Metals**. 1974, New York, Acad. Press.
- [18]. Tawger B.A., Demikhovskii Y.Ya. **Sov. Phys.Usp**. 1969, v.11, p644.
- [19]. Friedman L.J. **Phys. C**. 1984, v.17, p3999.
- [20]. Alfetorov J.I., Shimaev Y.V., Shmartzev Y.M. **Physics and Tecnic Semiconductor**. 1971, v.5, p196.
- [21]. Esaki L. **Proc. Int. Conf. on Semiconductors Heterojunctions and Layered Structura** . Budapest, Akad, Kiado, Bdp. 1971, v.1, p17.
- [22]. Dingle R., Wiegsmam W., Henry C.M. **Phys. Rev. Lett**. 1974, v.33, p827.

- [23]. Hasegawa H. **Quantum Chemistry and Technology in the Mesoscopic Level**. 1994, Tokyo, Komiyama Printing.
- [24]. Notomi M., Nojima S., Okamoto M., Iwamura M., Tamamura T. **Phys. Rev. B**. 1995, v52, p11075.
- [25]. Volcov V.A., Pinskev T.N. **Soviet. Phys. Solid State**. 1971, v.13, p1138.
- [26]. Mc Gurn A., Maradudin A.A. **Phys. Rev. B**. 1984, v.30, p3136.
- [27]. Chaplik A.V., Baskin E.M., Entin M.V. **Soviet. Phys. -JETP**. 1972, v.63, p1072.
- [28]. Ziman J.M. **Modern Quantum Theory**. 1975, New York, Perg. Press.
- [29]. Bonnell D.A. **Scanning Tunneling Microscopy and Spectroscopy**. 1993, Cambridge, VCM Publishers.
- [30]. Born M., Wolf E. **Principles of Optics**. 1959, London, Pergamon.
- [31]. Zeeger R. **Physics of Semiconductors**. 1977, Berlin, Springer Verlag.
- [32]. Flugge S. **Practical Quantum Mechanics T**. 1971, Berlin, Springer Verlag.
- [33]. Colmers W.S. **Intrduciton to Quantum Mechanics**. 1960, New York, MRW.
- [34]. Morse P.M., Feshbach J. **Methods of Theoretical Physics**. 1953, New York, McGraw Mill.
- [35]. Bastard G., Brum J.A. **IEEE. Quant. Eléctron**. 1986,v.22, p1625.
- [36]. Burdeynyy V.M., Macamo A., Tchernych V.V. **Electronic States Localised on Geometrical Non-uniformities of Abrupt Heterojunction**. SAIP-43rd Annual Conference (7-10 July 1998), p60.

ANEXOS

ANEXO1.

3. Filme de Espessura Variável e Aproximação Adiabática.

Apresentação dos resultados do cálculo diferencial da equação (3.12).

Lembremos que $\Psi_n(z) = \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d}$, então:

$$\nabla^2 \Psi_n(z) = \vec{\nabla} \left[\vec{\nabla} \left(\sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} \right) \right] \quad (3.a)$$

Também recorda-se que $\Psi_n(z)$ depende de r , através do parâmetro "d" e " ξ_1 ", pois:

$$\begin{aligned} \vec{\nabla} \left[\sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} \right] &= -\frac{\sqrt{2}}{2} d^{-3/2} \vec{\nabla} d \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} + \\ &+ \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{z - \xi_1}{d} \right) \cdot \pi n \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d}, \end{aligned} \quad (3.b)$$

mas $\vec{\nabla} \left[\frac{z - \xi_1}{d} \right] = -\frac{\vec{\nabla} \xi_1}{d} - \frac{z - \xi_1}{d^2} \vec{\nabla} d$, onde "z" não depende de r .

Pois das equações (3.b) e (3.a) obtêm-se:

$$\nabla^2 \Psi_n(z) = \vec{\nabla} \left[-\frac{\sqrt{2}}{2} d^{-3/2} \vec{\nabla} d \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} + \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \vec{\nabla} \left(\frac{z - \xi_1}{d} \right) \cdot \pi n \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} \right] \quad (3.c)$$

Para simplificar o cálculo diferencial da fórmula diferencial (3.c), subdividi-mo-la em dois aditivos, que são:

$$\begin{aligned} A_1 &= 3 \frac{\sqrt{2}}{4} d^{-3/2} \left(\vec{\nabla} d \right)^2 \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} - \frac{\sqrt{2}}{2} d^{-3/2} \nabla^2 d \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} + \frac{\sqrt{2}}{2} d^{-3/2} \vec{\nabla} d \cdot \\ &\cdot \pi n \cdot \frac{\vec{\nabla} \xi_1}{d} \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} + \frac{\sqrt{2}}{2} d^{-3/2} \vec{\nabla} d \cdot \pi n \cdot \frac{(z - \xi_1)}{d^2} \cdot \vec{\nabla} d \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d}, \end{aligned} \quad (3.d)$$

$$\begin{aligned} A_2 &= \frac{\sqrt{2}}{2} d^{-3/2} \vec{\nabla} d \cdot \pi n \cdot \frac{\vec{\nabla} \xi_1}{d} \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} + \frac{\sqrt{2}}{2} d^{-3/2} \vec{\nabla} d \cdot \pi n \cdot \frac{(z - \xi_1)}{d^2} \cdot \vec{\nabla} d \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} - \\ &- \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot (\pi n)^2 \cdot \left(\frac{\vec{\nabla} \xi_1}{d} \right)^2 \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} - 2 \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot (\pi n)^2 \cdot \frac{\vec{\nabla} \xi_1 \cdot (z - \xi_1)}{d^2} \cdot \vec{\nabla} d \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} - \\ &- \sqrt{\frac{2}{d}} (\pi n)^2 \cdot \left[\frac{(z - \xi_1)}{d^2} \vec{\nabla} d \right]^2 \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} - \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \pi n \cdot \frac{\nabla^2 \xi_1}{d} \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} + \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \pi n \cdot \frac{\vec{\nabla} \xi_1 \cdot \vec{\nabla} d}{d^2} \cdot \\ &\cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} + 2 \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \pi n \cdot \frac{(z - \xi_1)}{d^3} \vec{\nabla} d \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} + \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \pi n \cdot \frac{\vec{\nabla} \xi_1 \cdot \vec{\nabla} d}{d^2} \cdot \\ &\cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} - \sqrt{\frac{2}{d}} \cdot \pi n \cdot \frac{(z - \xi_1)}{d^2} \nabla^2 d \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} \end{aligned} \quad (3.f)$$

Substituindo as equações (3.d) e (3.f) à equação (3.c), obtém-se a solução da equação (3.10). Pois, esta é substituída à equação (3.11), posteriormente procede-se sua integração, multiplicando-a com o conjugado da função da $\Psi_n(z)$. Mas para tornar a integral simples, pode-se agrupar os termos semelhantes das equações (3.d) e (3.f), nesta integração obtém-se o resultado da equação (3.13).

I. Cálculo dos elementos da diagonal, para $n=1$.

$$1) \quad (z - \xi_1)^0 \left\{ \begin{array}{l} \left[\frac{3}{4} \sqrt{2} d^{-3/2} (\vec{\nabla} d)^2 - \frac{\sqrt{2}}{2} d^{-3/2} \nabla^2 d - \sqrt{\frac{2}{d}} \left(\frac{\vec{\nabla} \xi_1}{d} \right)^2 (\pi m)^2 \right] \\ \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1) \pi m}{d} \end{array} \right\} \quad , \quad (I.1)$$

$$\beta_0 = \frac{3}{4} \sqrt{2} d^{-3/2} (\vec{\nabla} d)^2 - \frac{\sqrt{2}}{2} d^{-3/2} \nabla^2 d - \sqrt{\frac{2}{d}} \left(\frac{\vec{\nabla} \xi_1}{d} \right)^2 (\pi m)^2 \quad (I.2)$$

O primeiro componente do integral será :

$$I_0 = \beta_0 \frac{2}{d} \int_{\xi_1}^{\xi_0 + \xi_2} \text{sen} \frac{(z - \xi_1) \pi m}{d} \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1) \pi l}{d} dz \quad , \quad (I.3)$$

sabe-se que: $\delta_n = \begin{cases} 0, n \neq l \\ 1, n = l \end{cases} ; \quad x = z - \xi_1 ; \quad dx = dz . \quad (I.4)$

$$I_0 = \beta_0 \frac{2}{d} \int \text{sen} \pi m \frac{x}{d} \cdot \text{sen} \pi l \frac{x}{d} dx = \beta_0 \delta_n \quad (I.5)$$

$$2) \quad (z - \xi_1)^1 \left\{ \left[3\sqrt{2} d^{-7/2} \vec{\nabla} d \vec{\nabla} d - \sqrt{2} d^{-5/2} \nabla^2 d \right] \cdot \pi m \cdot \cos \frac{(z - \xi_1) \pi m}{d} \right\} \quad , \quad (I.6)$$

$$\beta_1 = \left(3\sqrt{2} d^{-7/2} \vec{\nabla} d \vec{\nabla} d - \sqrt{2} d^{-5/2} \nabla^2 d \right) \cdot \pi m \quad (I.7)$$

O segundo componente do integral será :

$$I_1 = \beta_1 \frac{2}{d} \int_{\xi_1}^{d_0+\xi_2} (z - \xi_1) \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi m}{d} dz \quad , \quad (\text{I.8})$$

$$\begin{aligned} I_1 &= \beta_1 \frac{2}{d} \int_0^d x \cdot \cos \frac{\pi x n}{d} \cdot \text{sen} \frac{\pi x m}{d} dx = \\ &= \frac{\beta_1}{d} \left[-\frac{d^2}{2\pi n} \cdot \cos 2\pi n + \left(\frac{d}{2\pi m}\right)^2 \cdot \text{sen} 2\pi m \right] = -\beta_1 \frac{d}{2\pi m} \quad . \end{aligned} \quad (\text{I.9})$$

$$3) \quad (z - \xi_1) \left[-2\sqrt{2}d^{-1/2} (\pi m)^2 \vec{\nabla} \xi_1 \vec{\nabla} d \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi m}{d} \right] \quad , \quad (\text{I.10})$$

$$\beta_2 = -2\sqrt{2}d^{-1/2} \vec{\nabla} \xi_1 \vec{\nabla} d (\pi m)^2 \quad . \quad (\text{I.11})$$

O terceiro componente do integral será :

$$I_2 = \beta_2 \frac{2}{d} \int_{\xi_1}^{d_0+\xi_2} (z - \xi_1) \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi m}{d} dz \quad , \quad (\text{I.12})$$

$$I_2 = \beta_2 \frac{2}{d} \int_0^d x \cdot \text{sen}^2 \frac{\pi x n}{d} \cdot dx = \frac{\beta_2}{d} \left[\frac{d^2}{2} - \frac{d^2}{2\pi n} \text{sen} 2\pi n - \left(\frac{d}{2\pi m}\right)^2 \cos 2\pi m + \left(\frac{d}{2\pi m}\right)^2 \right] = \frac{\beta_2 d}{2} \quad . \quad (\text{I.13})$$

$$4) \quad (z - \xi_1)^2 \left[-\sqrt{2}d^{-1/2} (\pi n)^2 \left(\vec{\nabla} d\right)^2 \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} \right] \quad , \quad (\text{I.14})$$

$$\beta_3 = -\sqrt{2}d^{-1/2} \left(\vec{\nabla} d\right)^2 (\pi n)^2 \quad . \quad (\text{I.15})$$

O quarto componente do integral será :

$$I_3 = \beta_3 \frac{2}{d} \int_{\xi_1}^{d_0+\xi_2} (z - \xi_1)^2 \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi m}{d} dz \quad , \quad (\text{I.16})$$

$$I_3 = \beta_3 \frac{2}{d} \int_0^d x^2 \text{sen}^2 \frac{\pi x n}{d} dx = \beta_3 d^2 \left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2(\pi n)^2} \cos 2\pi n \right] = \beta_3 d^2 \left[\frac{1}{3} - \frac{1}{2\pi^2 n^2} \right] \quad . \quad (\text{I.17})$$

$$5) \left[\frac{\vec{\nabla} \xi_1}{d} \sqrt{2d}^{-3/2} \vec{\nabla} d + \frac{\nabla^2 \xi_1}{d} \sqrt{\frac{2}{d}} + \frac{\vec{\nabla} \xi_1 \vec{\nabla} d}{d^2} \cdot 2\sqrt{\frac{2}{d}} \right] \cdot \pi n \cdot \cos \frac{(z - \xi_1) \pi n}{d} \quad (I.18)$$

$$\beta_4 = \left(\frac{\vec{\nabla} \xi_1}{d} \sqrt{2d}^{-3/2} \vec{\nabla} d + \frac{\nabla^2 \xi_1}{d} \sqrt{\frac{2}{d}} + \frac{\vec{\nabla} \xi_1 \vec{\nabla} d}{d^2} \cdot 2\sqrt{\frac{2}{d}} \right) \cdot \pi n \quad (I.19)$$

O quinto componente do integral será :

$$I_4 = \beta_4 \frac{2}{d} \int_{\xi_1}^{\xi_0 + \xi_2} \cos \frac{(z - \xi_1) \pi n}{d} \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1) \pi l}{d} dz \quad (I.20)$$

$$I_4 = \beta_4 \frac{1}{d} \int_0^d \text{sen} \frac{2\pi x n}{d} dx = \beta_4 \frac{1}{d} \left[-\frac{d}{2\pi n} \cdot \cos 2\pi n + \frac{d}{2\pi n} \right] = 0 \quad (I.21)$$

Somando estes resultados de integração, obtém-se a equação (3.14).

II. Cálculo dos elementos não diagonais, para $n \neq l$.

Usando a seqüência dos cálculos anteriores ter-se-á o seguinte:

$$1) \quad I_0 = \frac{2\beta_0}{d} \int_{\xi_1}^{\xi_0 + \xi_2} \text{sen} \frac{(z - \xi_1) \pi n}{d} \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1) \pi l}{d} dz \quad (II.1)$$

$$I_0 = -\frac{\beta_0}{d} \left[\frac{d}{\pi(n+l)} \text{sen}(n+l)\pi - \frac{d}{\pi(n-l)} \text{sen}(n-l)\pi \right] = 0 \quad (II.2)$$

$$2) \quad I_1 = \beta_1 \frac{2}{d} \int_{\xi_1}^{\xi_0 + \xi_2} (z - \xi_1) \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1) \pi n}{d} \cdot \cos \frac{(z - \xi_1) \pi l}{d} dz \quad (II.3)$$

$$I_1 = \frac{\beta_1}{d} \left[\int_0^d x \cdot \text{sen} \frac{(n+l)\pi x}{d} dx + \int_0^d x \cdot \text{sen} \frac{(n-l)\pi x}{d} dx \right] \quad (II.4)$$

$$I_1 = -\frac{\beta_1 d}{\pi} \left[\frac{(-1)^{n+l}}{n+l} + \frac{(-1)^{n-l}}{n-l} \right] = -\frac{2\beta_1 d}{\pi} \cdot \frac{n}{n^2 - l^2} (-1)^{n+l} \quad (II.5)$$

$$3) \quad I_2 = \beta_2 \frac{2}{d} \int_{\xi_1}^{\xi_0 + \xi_2} (z - \xi_1)^2 \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1) \pi n}{d} \cdot \text{sen} \frac{(z - \xi_1) \pi l}{d} dz \quad (II.6)$$

$$I_2 = -\frac{\beta_2}{d} \left[\int_0^d x \cos \frac{(n+l)\pi x}{d} dx - \int_0^d x \cos \frac{(n-l)\pi x}{d} dx \right], \quad (\text{II.7})$$

$$I_2 = -\frac{\beta_2}{d} \left[\frac{d^2}{\pi^2(n+l)^2} \cdot \cos(n+l)\pi - \frac{d^2}{\pi^2(n+l)^2} - \frac{d^2}{\pi^2(n-l)^2} \cdot \cos(n-l)\pi + \frac{d^2}{\pi^2(n-l)^2} \right], \quad (\text{II.8})$$

$$I_2 = \frac{\beta_2 d}{\pi^2} \left[\frac{1 - (-1)^{n+l}}{(n+l)^2} - \frac{1 - (-1)^{n-l}}{(n-l)^2} \right]. \quad (\text{II.9})$$

4)
$$I_3 = \frac{2\beta_3}{d} \int_{\xi_1}^{\xi_0 + \xi_2} (z - \xi_1)^2 \operatorname{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} \cdot \operatorname{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi l}{d} dz, \quad (\text{II.10})$$

$$I_3 = -\frac{\beta_3}{d} \left[\int_0^d x^2 \cos \frac{(n+l)\pi x}{d} dx - \int_0^d x^2 \cos \frac{(n-l)\pi x}{d} dx \right], \quad (\text{II.11})$$

$$I_3 = -\frac{\beta_3}{d} \left[\frac{2d^3}{\pi^2(n+l)^2} \cos(n+l)\pi - \frac{2d^3}{\pi^2(n-l)^2} \cos(n-l)\pi \right], \quad (\text{II.12})$$

$$I_3 = -\frac{2\beta_3 d^2}{\pi^2} \left[\frac{(-1)^{n+l}}{(n+l)^2} - \frac{(-1)^{n-l}}{(n-l)^2} \right] = \frac{8\beta_3 d^2}{\pi^2} (-1)^{n+l} \cdot \frac{nl}{(n^2 - l^2)^2}. \quad (\text{II.13})$$

5)
$$I_4 = \frac{2\beta_4}{d} \int_{\xi_1}^{\xi_0 + \xi_2} \operatorname{sen} \frac{(z - \xi_1)\pi n}{d} \cdot \cos \frac{(z - \xi_1)\pi l}{d} dz, \quad (\text{II.14})$$

$$I_4 = \frac{\beta_4}{d} \left[\int_0^d \operatorname{sen} \frac{(n+l)\pi x}{d} dx + \int_0^d \operatorname{sen} \frac{(n-l)\pi x}{d} dx \right], \quad (\text{II.15})$$

$$I_4 = \frac{\beta_4}{d} \left[-\frac{d}{\pi(n+l)} \cdot \cos(n+l)\pi + \frac{d}{\pi(n+l)} - \frac{d}{\pi(n-l)} \cdot \cos(n-l)\pi + \frac{d}{\pi(n-l)} \right], \quad (\text{II.16})$$

$$I_4 = \frac{\beta_4}{\pi} \left[\frac{1 - (-1)^{n+l}}{n+l} + \frac{1 - (-1)^{n-l}}{n-l} \right]. \quad (\text{II.17})$$

Somando estes resultados de integração, obtém-se a equação (3.15).

ANEXO2.

5. Dedução da equação secular.

Para simplificar a dedução tomamos o produto das matrizes de transferência com seguintes elementos:

$$\hat{T}(k; -b; -d) = \hat{T}(k; b; d) = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{11} \end{pmatrix}, \quad (5.a)$$

$$\hat{T}(\chi; -b; -a) \cdot \hat{T}(k; -a; a) \cdot \hat{T}(\chi; a; b) = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix}, \quad (5.b)$$

$$\begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi ch \chi \Delta & -sh \chi \Delta \\ -\chi^2 sh \chi \Delta & \chi ch \chi \Delta \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} k \cos 2ka & -sen 2ka \\ k^2 sen 2ka & k \cos 2ka \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \chi ch \chi \Delta & -sh \chi \Delta \\ \chi^2 sh \chi \Delta & \chi ch \chi \Delta \end{pmatrix}, \quad (5.c)$$

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{11} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} k \cos k\Delta_1 & -sen k\Delta_1 \\ k^2 sen k\Delta_1 & k \cos k\Delta_1 \end{pmatrix}. \quad (5.d)$$

Então, substituindo estas relações à equação (5.21), a matriz determinante apresentar-se-á de tal modo:

$$\left\| \frac{1}{k} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{11} \end{pmatrix} - \frac{\exp(-2iqd)}{\chi^2 k^2} \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ -a_{21} & a_{11} \end{pmatrix} \right\| = 0 \quad (5.e)$$

Desenvolvendo, o determinante terá seguinte composição :

$$\left\| \begin{array}{cc} \frac{a_{11}}{k} - \frac{\exp(-2iqd)}{\chi^2 k^2} (b_{11} \cdot a_{11} - b_{12} \cdot a_{21}) & \frac{a_{12}}{k} - \frac{\exp(-2iqd)}{\chi^2 k^2} (-b_{11} \cdot a_{12} + b_{12} \cdot a_{11}) \\ \frac{a_{21}}{k} - \frac{\exp(-2iqd)}{\chi^2 k^2} (b_{21} \cdot a_{11} - b_{22} \cdot a_{21}) & \frac{a_{11}}{k} - \frac{\exp(-2iqd)}{\chi^2 k^2} (-b_{21} \cdot a_{12} + b_{22} \cdot a_{11}) \end{array} \right\| = 0 \quad (5.f)$$

O resultado a encontrar nesta transformação será :

$$\begin{aligned} & \frac{a^2_{11} - a_{21} \cdot a_{12}}{k^2} \cdot \exp(2iqd) + \frac{\exp(-2iqd)}{\chi^4 k^4} \cdot \\ & \cdot [(b_{11} a_{11} - b_{12} a_{21}) \cdot (b_{22} a_{11} - b_{21} a_{12}) - (b_{12} a_{11} - b_{11} a_{12}) \cdot (b_{21} a_{11} - b_{22} a_{21})] = \\ & = \frac{1}{\chi^2 k^3} \cdot [(b_{22} + b_{11}) \cdot (a^2_{11} + a_{12} a_{21}) - 2a_{11} b_{21} a_{12} - 2a_{11} b_{12} a_{21}] \end{aligned} \quad (5.g)$$

Para tornar o cálculo mais simples, pode se tomar a equação (5.g) em partes, sendo: A parte direita, desta equação depois de substituir pelos elementos equivalentes da matriz (5.d), obtêm-se a equação :

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\chi^2 k^3} \cdot [(b_{22} + b_{11}) \cdot (a^2_{11} + a_{12} a_{21}) - 2a_{11} b_{21} a_{12} - 2a_{11} b_{12} a_{21}] = \\ & = \frac{1}{\chi^2 k} \cdot \left[(b_{22} + b_{11}) \cdot \cos 2k\Delta_1 + \left(\frac{b_{21}}{k} - kb_{12} \right) \cdot \text{sen } 2k\Delta_1 \right] \end{aligned} \quad (5.h)$$

Sabe-se que , da equação (5.c), cada elemento de matriz é :

$$\left. \begin{aligned} b_{11} &= b_{22} = \chi^2 kch2\chi\Delta \cdot \cos 2ka + \frac{1}{2}(\chi^3 - \chi k^2) \cdot sh2\chi\Delta \cdot \text{sen } 2ka \\ b_{12} &= -\chi ksh2\chi\Delta \cdot \cos 2ka + (k^2 sh^2 \chi\Delta - \chi^2 ch^2 \chi\Delta) \cdot \text{sen } 2ka \\ b_{21} &= -\chi^3 ksh2\chi\Delta \cdot \cos 2ka + (\chi^2 k^2 ch^2 \chi\Delta - \chi^4 sh^2 \chi\Delta) \cdot \text{sen } 2ka \end{aligned} \right\} \quad (5.i)$$

Separando parte direita da equação (5.h) em dois aditivos e substituir para cada as relações (5.i) obtêm-se

$$\frac{1}{\chi^2 k} (b_{22} + b_{11}) \cdot \cos 2k\Delta_1 = 2 \cdot \left(ch2\chi\Delta \cdot \cos 2ka + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \cdot sh2\chi\Delta \cdot \text{sen } 2ka \right) \cdot \cos 2k\Delta_1, \quad (5.j)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\chi^2 k} \left(\frac{b_{21}}{k} - kb_{12} \right) \cdot \text{sen } 2k\Delta_1 = \\ & = 2 \cdot \left[\frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \cdot sh2\chi\Delta \cdot \cos 2ka - \left(ch^2 \chi\Delta - \frac{\chi^4 + k^4}{2\chi^2 k^2} \cdot sh^2 \chi\Delta \right) \cdot \text{sen } 2ka \right] \cdot \text{sen } 2k\Delta_1 \end{aligned} \quad (5.l)$$

Encontradas as soluções dos dois aditivos, substituir à equação (5.h) obtêm-se:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{\chi^2 k} \left[(b_{22} + b_{11}) \cdot \cos 2k\Delta_1 + \left(\frac{b_{21}}{k} - kb_{12} \right) \cdot \operatorname{sen} 2k\Delta_1 \right] = \\ & = 2 \cdot \left\{ \left(ch 2\chi\Delta \cdot \cos 2ka + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \cdot sh 2\chi\Delta \cdot \operatorname{sen} 2ka \right) \cdot \cos 2k\Delta_1 - \right. \\ & \left. - \left[\frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} \cdot sh 2\chi\Delta \cdot \cos 2ka - \left(ch^2 \chi\Delta - \frac{\chi^4 + k^4}{2\chi^2 k^2} \cdot sh^2 \chi\Delta \right) \cdot \operatorname{sen} 2ka \right] \cdot \operatorname{sen} 2k\Delta_1 \right\} . \end{aligned} \quad (5.m)$$

Por analogia e considerando os elementos (5.i) das matrizes, tomando em conta que:

$$\frac{a^2_{11} - a_{21}a_{12}}{k^2} = 1 , \quad (5.o)$$

$$ch^2 \chi\Delta = \frac{1}{2}(ch 2\chi\Delta + 1) , \quad (5.p)$$

$$sh^2 \chi\Delta = \frac{1}{2}(ch 2\chi\Delta - 1) . \quad (5.q)$$

O membro esquerdo da equação (5.g) será:

$$\begin{aligned} & (a^2_{11} - a_{21}a_{12}) \frac{\exp(2iqd)}{k^2} + \frac{\exp(-2iqd)}{\chi^4 k^4} [(b_{11}a_{11} - b_{12}a_{21}) \cdot (b_{22}a_{11} - b_{21}a_{12}) - \\ & - (b_{12}a_{11} - b_{11}a_{12}) \cdot (b_{21}a_{11} - b_{22}a_{21})] = \exp(2iqd) + \exp(-2iqd) = 2 \cdot \cos 2qd . \end{aligned} \quad (5.r)$$

Realizadas as operações, substituindo as equações (5.m) e (5.r) à equação (5.g), obtêm-se a equação secular procurada:

$$\begin{aligned} & \left\{ \left(ch 2\chi\Delta \cos 2ka + \frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} sh 2\chi\Delta \operatorname{sen} 2ka \right) \cos 2k\Delta_1 - \left[\frac{\chi^2 - k^2}{2\chi k} sh 2\chi\Delta \cos 2ka - \right. \right. \\ & \left. \left. - \left(ch^2 \chi\Delta - \frac{\chi^4 + k^4}{2\chi^2 k^2} sh^2 \chi\Delta \right) \operatorname{sen} 2ka \right] \operatorname{sen} 2k\Delta_1 \right\} = \cos 2qd . \end{aligned} \quad (5.s) \Leftrightarrow (5.22)$$

ANEXO3

Programa para o cálculo numérico do primeiro membro da equação (5.22) em função da energia adimensional normalizada.

```

PROGRAM Macamo;
uses printer,crt;
const
  a=2.0E-10;b=5.0E-10;d=2.0E-9;s=5.0E-10;n=1;pi=3.14;

var
  x,y1,y2,y3,y4,fx:real;

begin
  clrscr;

  x:=0.06;
  while x<=1 do
  begin

    y1:=((2*pi*n*s)*sqrt(1-x))/d;
    y2:=((2*pi*n*s*a)*sqrt(x))/(d*(b-a));
    y3:=((2*pi*n*s*(d-b))*sqrt(x))/(d*(b-a));
    y4:=((pi*n*s)*sqrt(1-x))/d;
    fx:=(((exp(y1)+exp(-y1))/2)*cos(y2)+
      (1-2*x)/(2*sqrt(x*(1-x)))*
      ((exp(y1)-exp(-y1))/2)*sin(y2))*cos(y3)+
      (((1-2*x)/(2*sqrt(x*(1-x))))*((exp(y1)-exp(-y1))/2)*
      cos(y2)-(sqr((exp(y4)+exp(-y4))/2)-
      (1-2*x+2*sqr(x))/(2*x*(1-x))*
      sqr((exp(y4)-exp(-y4))/2))*sin(y2))*sin(y3);
    write('x=',x:4:4);write(' y1=',y1:4:4);write(' y2=',y2:4:4);
    write(' y3=',y3:4:4);write(' y4=',y4:4:4);write(' fx=',fx:4:4);
    x:=x+0.005;
    writeln;
  end;
  readln;
End.

```

ANEXO4

Resultados do cálculo numérico da função de energia adimensional normalizada para valores razoáveis (escolhidos) dos parâmetros geométricos dos filmes, de acordo com o programa em anexo3.

x=0.0600	y1=1.5222	y2=0.2564	y3=1.9228	y4=0.7611	fx=3.4226
x=0.0650	y1=1.5181	y2=0.2668	y3=2.0014	y4=0.7591	fx=2.7736
x=0.0700	y1=1.5141	y2=0.2769	y3=2.0769	y4=0.7570	fx=2.1720
x=0.0750	y1=1.5100	y2=0.2866	y3=2.1498	y4=0.7550	fx=1.6154
x=0.0800	y1=1.5059	y2=0.2960	y3=2.2203	y4=0.7529	fx=1.1016
x=0.0850	y1=1.5018	y2=0.3052	y3=2.2886	y4=0.7509	fx=0.6285
x=0.0900	y1=1.4977	y2=0.3140	y3=2.3550	y4=0.7488	fx=0.1943
x=0.0950	y1=1.4936	y2=0.3226	y3=2.4195	y4=0.7468	fx=-0.2032
x=0.1000	y1=1.4894	y2=0.3310	y3=2.4824	y4=0.7447	fx=-0.5657
x=0.1050	y1=1.4853	y2=0.3392	y3=2.5437	y4=0.7426	fx=-0.8951
x=0.1100	y1=1.4811	y2=0.3471	y3=2.6036	y4=0.7406	fx=-1.1931
x=0.1150	y1=1.4770	y2=0.3549	y3=2.6621	y4=0.7385	fx=-1.4613
x=0.1200	y1=1.4728	y2=0.3626	y3=2.7193	y4=0.7364	fx=-1.7013
x=0.1250	y1=1.4686	y2=0.3701	y3=2.7754	y4=0.7343	fx=-1.9148
x=0.1300	y1=1.4644	y2=0.3774	y3=2.8304	y4=0.7322	fx=-2.1032
x=0.1350	y1=1.4602	y2=0.3846	y3=2.8843	y4=0.7301	fx=-2.2678
x=0.1400	y1=1.4560	y2=0.3916	y3=2.9372	y4=0.7280	fx=-2.4101
x=0.1450	y1=1.4517	y2=0.3986	y3=2.9892	y4=0.7259	fx=-2.5315
x=0.1500	y1=1.4475	y2=0.4054	y3=3.0403	y4=0.7237	fx=-2.6330
x=0.1550	y1=1.4432	y2=0.4121	y3=3.0905	y4=0.7216	fx=-2.7161
x=0.1600	y1=1.4389	y2=0.4187	y3=3.1400	y4=0.7195	fx=-2.7818
x=0.1650	y1=1.4346	y2=0.4252	y3=3.1887	y4=0.7173	fx=-2.8312
x=0.1700	y1=1.4303	y2=0.4316	y3=3.2366	y4=0.7152	fx=-2.8654
x=0.1750	y1=1.4260	y2=0.4379	y3=3.2839	y4=0.7130	fx=-2.8855
x=0.1800	y1=1.4217	y2=0.4441	y3=3.3305	y4=0.7108	fx=-2.8924
x=0.1850	y1=1.4174	y2=0.4502	y3=3.3764	y4=0.7087	fx=-2.8870
x=0.1900	y1=1.4130	y2=0.4562	y3=3.4217	y4=0.7065	fx=-2.8703
x=0.1950	y1=1.4086	y2=0.4622	y3=3.4665	y4=0.7043	fx=-2.8431
x=0.2000	y1=1.4043	y2=0.4681	y3=3.5106	y4=0.7021	fx=-2.8063
x=0.2050	y1=1.3999	y2=0.4739	y3=3.5542	y4=0.6999	fx=-2.7605
x=0.2100	y1=1.3954	y2=0.4796	y3=3.5973	y4=0.6977	fx=-2.7067
x=0.2150	y1=1.3910	y2=0.4853	y3=3.6399	y4=0.6955	fx=-2.6454
x=0.2200	y1=1.3866	y2=0.4909	y3=3.6820	y4=0.6933	fx=-2.5773
x=0.2250	y1=1.3821	y2=0.4965	y3=3.7236	y4=0.6911	fx=-2.5032
x=0.2300	y1=1.3777	y2=0.5020	y3=3.7647	y4=0.6888	fx=-2.4235
x=0.2350	y1=1.3732	y2=0.5074	y3=3.8054	y4=0.6866	fx=-2.3390
x=0.2400	y1=1.3687	y2=0.5128	y3=3.8457	y4=0.6843	fx=-2.2502
x=0.2450	y1=1.3642	y2=0.5181	y3=3.8856	y4=0.6821	fx=-2.1575
x=0.2500	y1=1.3597	y2=0.5233	y3=3.9250	y4=0.6798	fx=-2.0615
x=0.2550	y1=1.3551	y2=0.5285	y3=3.9641	y4=0.6776	fx=-1.9627
x=0.2600	y1=1.3506	y2=0.5337	y3=4.0027	y4=0.6753	fx=-1.8615
x=0.2650	y1=1.3460	y2=0.5388	y3=4.0410	y4=0.6730	fx=-1.7584
x=0.2700	y1=1.3414	y2=0.5439	y3=4.0790	y4=0.6707	fx=-1.6536
x=0.2750	y1=1.3368	y2=0.5489	y3=4.1166	y4=0.6684	fx=-1.5478
x=0.2800	y1=1.3322	y2=0.5538	y3=4.1538	y4=0.6661	fx=-1.4411
x=0.2850	y1=1.3276	y2=0.5588	y3=4.1908	y4=0.6638	fx=-1.3339
x=0.2900	y1=1.3229	y2=0.5636	y3=4.2274	y4=0.6615	fx=-1.2266
x=0.2950	y1=1.3182	y2=0.5685	y3=4.2636	y4=0.6591	fx=-1.1194

x=0.3000	y1=1.3136	y2=0.5733	y3=4.2996	y4=0.6568	fx=-1.0126
x=0.3050	y1=1.3089	y2=0.5780	y3=4.3353	y4=0.6544	fx=-0.9065
x=0.3100	y1=1.3041	y2=0.5828	y3=4.3707	y4=0.6521	fx=-0.8013
x=0.3150	y1=1.2994	y2=0.5874	y3=4.4058	y4=0.6497	fx=-0.6972
x=0.3200	y1=1.2947	y2=0.5921	y3=4.4406	y4=0.6473	fx=-0.5945
x=0.3250	y1=1.2899	y2=0.5967	y3=4.4752	y4=0.6449	fx=-0.4934
x=0.3300	y1=1.2851	y2=0.6013	y3=4.5095	y4=0.6426	fx=-0.3940
x=0.3350	y1=1.2803	y2=0.6058	y3=4.5435	y4=0.6401	fx=-0.2965
x=0.3400	y1=1.2755	y2=0.6103	y3=4.5773	y4=0.6377	fx=-0.2011
x=0.3450	y1=1.2706	y2=0.6148	y3=4.6108	y4=0.6353	fx=-0.1078
x=0.3500	y1=1.2658	y2=0.6192	y3=4.6441	y4=0.6329	fx=-0.0169
x=0.3550	y1=1.2609	y2=0.6236	y3=4.6772	y4=0.6304	fx=0.0716
x=0.3600	y1=1.2560	y2=0.6280	y3=4.7100	y4=0.6280	fx=0.1575
x=0.3650	y1=1.2511	y2=0.6323	y3=4.7426	y4=0.6255	fx=0.2409
x=0.3700	y1=1.2461	y2=0.6367	y3=4.7750	y4=0.6231	fx=0.3214
x=0.3750	y1=1.2412	y2=0.6409	y3=4.8071	y4=0.6206	fx=0.3992
x=0.3800	y1=1.2362	y2=0.6452	y3=4.8391	y4=0.6181	fx=0.4741
x=0.3850	y1=1.2312	y2=0.6494	y3=4.8708	y4=0.6156	fx=0.5462
x=0.3900	y1=1.2262	y2=0.6536	y3=4.9023	y4=0.6131	fx=0.6152
x=0.3950	y1=1.2212	y2=0.6578	y3=4.9336	y4=0.6106	fx=0.6813
x=0.4000	y1=1.2161	y2=0.6620	y3=4.9648	y4=0.6081	fx=0.7443
x=0.4050	y1=1.2110	y2=0.6661	y3=4.9957	y4=0.6055	fx=0.8042
x=0.4100	y1=1.2059	y2=0.6702	y3=5.0265	y4=0.6030	fx=0.8611
x=0.4150	y1=1.2008	y2=0.6743	y3=5.0570	y4=0.6004	fx=0.9149
x=0.4200	y1=1.1957	y2=0.6783	y3=5.0874	y4=0.5978	fx=0.9657
x=0.4250	y1=1.1905	y2=0.6823	y3=5.1176	y4=0.5953	fx=1.0133
x=0.4300	y1=1.1853	y2=0.6863	y3=5.1476	y4=0.5927	fx=1.0579
x=0.4350	y1=1.1801	y2=0.6903	y3=5.1774	y4=0.5901	fx=1.0994
x=0.4400	y1=1.1749	y2=0.6943	y3=5.2071	y4=0.5874	fx=1.1378
x=0.4450	y1=1.1696	y2=0.6982	y3=5.2366	y4=0.5848	fx=1.1733
x=0.4500	y1=1.1643	y2=0.7021	y3=5.2659	y4=0.5822	fx=1.2057
x=0.4550	y1=1.1590	y2=0.7060	y3=5.2951	y4=0.5795	fx=1.2352
x=0.4600	y1=1.1537	y2=0.7099	y3=5.3241	y4=0.5769	fx=1.2618
x=0.4650	y1=1.1484	y2=0.7137	y3=5.3530	y4=0.5742	fx=1.2855
x=0.4700	y1=1.1430	y2=0.7176	y3=5.3817	y4=0.5715	fx=1.3063
x=0.4750	y1=1.1376	y2=0.7214	y3=5.4102	y4=0.5688	fx=1.3244
x=0.4800	y1=1.1321	y2=0.7252	y3=5.4386	y4=0.5661	fx=1.3397
x=0.4850	y1=1.1267	y2=0.7289	y3=5.4669	y4=0.5633	fx=1.3523
x=0.4900	y1=1.1212	y2=0.7327	y3=5.4950	y4=0.5606	fx=1.3623
x=0.4950	y1=1.1157	y2=0.7364	y3=5.5230	y4=0.5578	fx=1.3697
x=0.5000	y1=1.1102	y2=0.7401	y3=5.5508	y4=0.5551	fx=1.3745
x=0.5050	y1=1.1046	y2=0.7438	y3=5.5785	y4=0.5523	fx=1.3769
x=0.5100	y1=1.0990	y2=0.7475	y3=5.6060	y4=0.5495	fx=1.3769
x=0.5150	y1=1.0934	y2=0.7511	y3=5.6334	y4=0.5467	fx=1.3745
x=0.5200	y1=1.0877	y2=0.7548	y3=5.6607	y4=0.5439	fx=1.3699
x=0.5250	y1=1.0820	y2=0.7584	y3=5.6879	y4=0.5410	fx=1.3631
x=0.5300	y1=1.0763	y2=0.7620	y3=5.7149	y4=0.5382	fx=1.3541
x=0.5350	y1=1.0706	y2=0.7656	y3=5.7418	y4=0.5353	fx=1.3430

x=0.5400	y1=1.0648	y2=0.7691	y3=5.7685	y4=0.5324	fx=1.3300
x=0.5450	y1=1.0590	y2=0.7727	y3=5.7952	y4=0.5295	fx=1.3150
x=0.5500	y1=1.0532	y2=0.7762	y3=5.8217	y4=0.5266	fx=1.2981
x=0.5550	y1=1.0473	y2=0.7797	y3=5.8481	y4=0.5237	fx=1.2795
x=0.5600	y1=1.0414	y2=0.7833	y3=5.8744	y4=0.5207	fx=1.2591
x=0.5650	y1=1.0355	y2=0.7867	y3=5.9006	y4=0.5177	fx=1.2371
x=0.5700	y1=1.0295	y2=0.7902	y3=5.9266	y4=0.5148	fx=1.2135
x=0.5750	y1=1.0235	y2=0.7937	y3=5.9526	y4=0.5118	fx=1.1883
x=0.5800	y1=1.0175	y2=0.7971	y3=5.9784	y4=0.5087	fx=1.1618
x=0.5850	y1=1.0114	y2=0.8005	y3=6.0041	y4=0.5057	fx=1.1339
x=0.5900	y1=1.0053	y2=0.8040	y3=6.0297	y4=0.5026	fx=1.1047
x=0.5950	y1=0.9991	y2=0.8074	y3=6.0552	y4=0.4996	fx=1.0742
x=0.6000	y1=0.9930	y2=0.8107	y3=6.0806	y4=0.4965	fx=1.0426
x=0.6050	y1=0.9867	y2=0.8141	y3=6.1059	y4=0.4934	fx=1.0099
x=0.6100	y1=0.9805	y2=0.8175	y3=6.1310	y4=0.4902	fx=0.9762
x=0.6150	y1=0.9742	y2=0.8208	y3=6.1561	y4=0.4871	fx=0.9416
x=0.6200	y1=0.9678	y2=0.8241	y3=6.1811	y4=0.4839	fx=0.9060
x=0.6250	y1=0.9614	y2=0.8275	y3=6.2060	y4=0.4807	fx=0.8697
x=0.6300	y1=0.9550	y2=0.8308	y3=6.2307	y4=0.4775	fx=0.8326
x=0.6350	y1=0.9485	y2=0.8341	y3=6.2554	y4=0.4743	fx=0.7948
x=0.6400	y1=0.9420	y2=0.8373	y3=6.2800	y4=0.4710	fx=0.7564
x=0.6450	y1=0.9354	y2=0.8406	y3=6.3045	y4=0.4677	fx=0.7174
x=0.6500	y1=0.9288	y2=0.8438	y3=6.3289	y4=0.4644	fx=0.6779
x=0.6550	y1=0.9222	y2=0.8471	y3=6.3532	y4=0.4611	fx=0.6380
x=0.6600	y1=0.9155	y2=0.8503	y3=6.3774	y4=0.4577	fx=0.5978
x=0.6650	y1=0.9087	y2=0.8535	y3=6.4015	y4=0.4544	fx=0.5572
x=0.6700	y1=0.9019	y2=0.8567	y3=6.4255	y4=0.4509	fx=0.5163
x=0.6750	y1=0.8950	y2=0.8599	y3=6.4494	y4=0.4475	fx=0.4752
x=0.6800	y1=0.8881	y2=0.8631	y3=6.4733	y4=0.4441	fx=0.4340
x=0.6850	y1=0.8812	y2=0.8663	y3=6.4970	y4=0.4406	fx=0.3927
x=0.6900	y1=0.8741	y2=0.8694	y3=6.5207	y4=0.4371	fx=0.3513
x=0.6950	y1=0.8671	y2=0.8726	y3=6.5443	y4=0.4335	fx=0.3100
x=0.7000	y1=0.8599	y2=0.8757	y3=6.5678	y4=0.4300	fx=0.2687
x=0.7050	y1=0.8527	y2=0.8788	y3=6.5912	y4=0.4264	fx=0.2275
x=0.7100	y1=0.8455	y2=0.8819	y3=6.6145	y4=0.4227	fx=0.1865
x=0.7150	y1=0.8382	y2=0.8850	y3=6.6378	y4=0.4191	fx=0.1457
x=0.7200	y1=0.8308	y2=0.8881	y3=6.6609	y4=0.4154	fx=0.1051
x=0.7250	y1=0.8233	y2=0.8912	y3=6.6840	y4=0.4117	fx=0.0648
x=0.7300	y1=0.8158	y2=0.8943	y3=6.7070	y4=0.4079	fx=0.0248
x=0.7350	y1=0.8082	y2=0.8973	y3=6.7300	y4=0.4041	fx=-0.0148
x=0.7400	y1=0.8005	y2=0.9004	y3=6.7528	y4=0.4003	fx=-0.0540
x=0.7450	y1=0.7928	y2=0.9034	y3=6.7756	y4=0.3964	fx=-0.0928
x=0.7500	y1=0.7850	y2=0.9064	y3=6.7983	y4=0.3925	fx=-0.1311
x=0.7550	y1=0.7771	y2=0.9095	y3=6.8209	y4=0.3886	fx=-0.1688
x=0.7600	y1=0.7691	y2=0.9125	y3=6.8435	y4=0.3846	fx=-0.2060
x=0.7650	y1=0.7611	y2=0.9155	y3=6.8659	y4=0.3805	fx=-0.2426
x=0.7700	y1=0.7529	y2=0.9184	y3=6.8883	y4=0.3765	fx=-0.2787
x=0.7750	y1=0.7447	y2=0.9214	y3=6.9107	y4=0.3724	fx=-0.3140

x=0.7800	y1=0.7364	y2=0.9244	y3=6.9329	y4=0.3682	fx=-0.3487
x=0.7850	y1=0.7280	y2=0.9273	y3=6.9551	y4=0.3640	fx=-0.3827
x=0.7900	y1=0.7195	y2=0.9303	y3=6.9772	y4=0.3597	fx=-0.4160
x=0.7950	y1=0.7108	y2=0.9332	y3=6.9993	y4=0.3554	fx=-0.4485
x=0.8000	y1=0.7021	y2=0.9362	y3=7.0213	y4=0.3511	fx=-0.4803
x=0.8050	y1=0.6933	y2=0.9391	y3=7.0432	y4=0.3466	fx=-0.5112
x=0.8100	y1=0.6843	y2=0.9420	y3=7.0650	y4=0.3422	fx=-0.5414
x=0.8150	y1=0.6753	y2=0.9449	y3=7.0868	y4=0.3376	fx=-0.5707
x=0.8200	y1=0.6661	y2=0.9478	y3=7.1085	y4=0.3330	fx=-0.5991
x=0.8250	y1=0.6568	y2=0.9507	y3=7.1301	y4=0.3284	fx=-0.6267
x=0.8300	y1=0.6473	y2=0.9536	y3=7.1517	y4=0.3237	fx=-0.6534
x=0.8350	y1=0.6377	y2=0.9564	y3=7.1732	y4=0.3189	fx=-0.6792
x=0.8400	y1=0.6280	y2=0.9593	y3=7.1946	y4=0.3140	fx=-0.7041
x=0.8450	y1=0.6181	y2=0.9621	y3=7.2160	y4=0.3091	fx=-0.7281
x=0.8500	y1=0.6081	y2=0.9650	y3=7.2373	y4=0.3040	fx=-0.7511
x=0.8550	y1=0.5978	y2=0.9678	y3=7.2586	y4=0.2989	fx=-0.7732
x=0.8600	y1=0.5874	y2=0.9706	y3=7.2798	y4=0.2937	fx=-0.7943
x=0.8650	y1=0.5769	y2=0.9735	y3=7.3009	y4=0.2884	fx=-0.8145
x=0.8700	y1=0.5661	y2=0.9763	y3=7.3220	y4=0.2830	fx=-0.8337
x=0.8750	y1=0.5551	y2=0.9791	y3=7.3430	y4=0.2775	fx=-0.8519
x=0.8800	y1=0.5439	y2=0.9819	y3=7.3640	y4=0.2719	fx=-0.8692
x=0.8850	y1=0.5324	y2=0.9846	y3=7.3848	y4=0.2662	fx=-0.8855
x=0.8900	y1=0.5207	y2=0.9874	y3=7.4057	y4=0.2604	fx=-0.9007
x=0.8950	y1=0.5087	y2=0.9902	y3=7.4264	y4=0.2544	fx=-0.9150
x=0.9000	y1=0.4965	y2=0.9930	y3=7.4472	y4=0.2482	fx=-0.9283
x=0.9050	y1=0.4839	y2=0.9957	y3=7.4678	y4=0.2420	fx=-0.9406
x=0.9100	y1=0.4710	y2=0.9985	y3=7.4884	y4=0.2355	fx=-0.9520
x=0.9150	y1=0.4577	y2=1.0012	y3=7.5090	y4=0.2289	fx=-0.9623
x=0.9200	y1=0.4441	y2=1.0039	y3=7.5295	y4=0.2220	fx=-0.9717
x=0.9250	y1=0.4300	y2=1.0067	y3=7.5499	y4=0.2150	fx=-0.9800
x=0.9300	y1=0.4154	y2=1.0094	y3=7.5703	y4=0.2077	fx=-0.9874
x=0.9350	y1=0.4003	y2=1.0121	y3=7.5906	y4=0.2001	fx=-0.9939
x=0.9400	y1=0.3846	y2=1.0148	y3=7.6109	y4=0.1923	fx=-0.9993
x=0.9450	y1=0.3682	y2=1.0175	y3=7.6311	y4=0.1841	fx=-1.0038
x=0.9500	y1=0.3511	y2=1.0202	y3=7.6512	y4=0.1755	fx=-1.0074
x=0.9550	y1=0.3330	y2=1.0228	y3=7.6713	y4=0.1665	fx=-1.0100
x=0.9600	y1=0.3140	y2=1.0255	y3=7.6914	y4=0.1570	fx=-1.0117
x=0.9650	y1=0.2937	y2=1.0282	y3=7.7114	y4=0.1469	fx=-1.0124
x=0.9700	y1=0.2719	y2=1.0308	y3=7.7314	y4=0.1360	fx=-1.0122
x=0.9750	y1=0.2482	y2=1.0335	y3=7.7513	y4=0.1241	fx=-1.0112
x=0.9800	y1=0.2220	y2=1.0361	y3=7.7711	y4=0.1110	fx=-1.0092
x=0.9850	y1=0.1923	y2=1.0388	y3=7.7909	y4=0.0961	fx=-1.0063
x=0.9900	y1=0.1570	y2=1.0414	y3=7.8107	y4=0.0785	fx=-1.0026
x=0.9950	y1=0.1110	y2=1.0440	y3=7.8304	y4=0.0555	fx=-0.9980